

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

PTE Nr. 62

BMW geförderte FuE-Vorhaben zur
„Endlagerung radioaktiver Abfälle“

Berichtszeitraum: 1. Juli - 31. Dezember 2021

Projekträger Karlsruhe (PTKA)
Entsorgung

April 2022

PTE-Berichte

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

Die Fortschrittsberichtsreihen behandeln folgende Themenschwerpunkte:

- Endlagerung 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/ptka-alt/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 01.10.2016 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 der „nuklearen Entsorgung“.

Im Rahmen dieses Auftrages betreut der Projektträger Karlsruhe fachlich und administrativ die vom BMWi geförderten FuE-Vorhaben zur Endlagerung radioaktiver Abfälle. Seit Januar 2021 ist das Projektförderprogramm „BMWi-Forschungsförderung zur nuklearen Sicherheit - Projektförderprogramm des Bundesministeriums für Wirtschaft und Energie zur Sicherheitsforschung für kerntechnische Anlagen (2021-2025)“ Grundlage der Projektförderung.

Dieses Projektförderprogramm beinhaltet vier Forschungsgebiete: A Reaktorsicherheit, B Verlängerte Zwischenlagerung und Behandlung hochradioaktiver Abfälle, C Endlagerung und D Querschnittsfragen, die von den Projektträgern PT-GRS und PTKA im Auftrag des BMWi betreut werden.

PTKA agiert insbesondere in den Forschungsgebieten *C Endlagerung* und *D Querschnittsfragen*, die in folgende *sechs FuE-Bereiche* aufgeteilt sind, innerhalb derer Projekte gefördert werden können:

- FuE-Bereich C1: Standortauswahl
- FuE-Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte; Endlagertechnik und (geo-)technische Barrieren
- FuE-Bereich C3: Sicherheitsnachweis
- FuE-Bereich D1: Wissens- und Kompetenzmanagement
- FuE-Bereich D2: Sozio-technische Fragestellungen
- FuE-Bereich D3: Kernmaterialüberwachung (Safeguards)

Der vorliegende Fortschrittsbericht dokumentiert Stand und Ergebnisse dieser FuE-Vorhaben aus diesen FuE-Bereichen. 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 ⇒ „Endlagerung radioaktiver Abfälle“ und
- W ⇒ „Kernmaterialüberwachung“.

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







Inhaltsverzeichnis

1	Verzeichnis der Vorhaben gemäß FuE-Bereiche.....	1
C	Forschungsgebiet Endlagerung	1
C1	Standortauswahl	1
C2	Sicherheits- und Endlagerkonzepte; Endlagertechnik und (geo-)technische Barrieren.....	3
C3	Sicherheitsnachweis	7
D	Querschnittsaufgaben	11
D1	Wissens- und Kompetenzmanagement	11
D2	Sozio-technische Fragestellungen	13
D3	Kernmaterialüberwachung (Safeguards).....	15
2	Formalisierte Zwischenberichte	17
2.2	VORHABEN BEREICH C	17
2.3	VORHABEN BEREICH D	187
	Information zu Publikationen sowie zu Aus- und Weiterbildung.....	213
3	Verzeichnis der Forschungsstellen	215

1 Verzeichnis der Vorhaben gemäß FuE-Bereiche

C Forschungsgebiet Endlagerung

C1 Standortauswahl

02 E 11637A	Verbundprojekt: Geomechanisch-numerische Modellierungen zur Charakterisierung des tektonischen Spannungszustandes für die Entsorgung radioaktiver Abfälle in Deutschland (SpannEnD), Teilprojekt A: 3D-Spannungsmodell und Aufskalierung	TU Darmstadt	 48
02 E 11637B	Verbundprojekt: Geomechanisch-numerische Modellierungen zur Charakterisierung des tektonischen Spannungszustandes für die Entsorgung radioaktiver Abfälle in Deutschland (SpannEnD), Teilprojekt B: Multiskalenansatz	Helmholtz-Zentrum Potsdam Deutsches GeoForschungsZentrum GFZ, Potsdam	 50
02 E 11637C	Verbundprojekt: Geomechanisch-numerische Modellierungen zur Charakterisierung des tektonischen Spannungszustandes für die Entsorgung radioaktiver Abfälle in Deutschland (SpannEnD), Teilprojekt C: Geomechanik von Sedimentbecken	Karlsruher Institut für Technologie (KIT)	 52
02 E 11829	Tonsteinforschung im Felslabor Mont Terri ab Phase 25 (MonTe-25)	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln	 96
02 E 11931	Einfluss der thermischen Reife auf die gekoppelten hydro-mechanischen Eigenschaften niedrig-durchlässiger Tonsteine – Feld & Laborskala (Maturity)	Rheinisch-Westfälische Technische Hochschule Aachen	 156
02 E 11991	Entwicklung und Validation einer neuartigen Versuchstechnik für triaxiale Kriechversuche bei geringer deviatorischer Belastung (KRIECHTECH)	TU Clausthal, Clausthal-Zellerfeld	 180

C2 Sicherheits- und Endlagerkonzepte; Endlagertechnik und (geo-)technische Barrieren

- | | | | |
|--------------------|---|--|------|
| 02 E 11577A | Verbundprojekt: Sicherheitsanalytische Untersuchungen zu Endlagersystemen im Kristallin (SUSE), Teilprojekt A | BGE Technology GmbH, Peine | 📖 30 |
| 02 E 11577B | Verbundprojekt: Sicherheitsanalytische Untersuchungen zu Endlagersystemen im Kristallin (SUSE), Teilprojekt B | Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln | 📖 32 |
| 02 E 11617A | Verbundprojekt: Entwicklung eines Sicherheits- und Nachweiskonzeptes für ein Endlager für Wärme entwickelnde radioaktive Abfälle im Kristallingestein in Deutschland (CHRISTA II), Teilprojekt A | BGE Technology GmbH, Peine | 📖 42 |
| 02 E 11617B | Verbundprojekt: Entwicklung eines Sicherheits- und Nachweiskonzeptes für ein Endlager für Wärme entwickelnde radioaktive Abfälle im Kristallingestein in Deutschland (CHRISTA II), Teilprojekt B | Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln | 📖 44 |
| 02 E 11627 | Arteigene Versatz- und Verschlussmaterialien für die Endlagerung hochradioaktiver Abfälle in Tonformationen (AVET) | Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln | 📖 46 |
| 02 E 11688 | Langzeitsicheres Abdichtungselement aus Salzschnittblöcken - Durchführung, Auswertung und Reanalyse von THM-Versuchen (Salzschnittblöcke III) | TU Clausthal, Clausthal-Zellerfeld | 📖 64 |
| 02 E 11698 | Untersuchung thermisch-hydraulisch-mechanisch-chemischer Einwirkungen auf zementbasierte Dichtelemente (THYMECZ) | Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln | 📖 66 |
| 02 E 11748A | Verbundprojekt: Strömungstechnischer Funktionsnachweis für Verschlussbauwerke und flüssigkeitsgestützte Abdichtung des Kontaktbereiches - Phase III: Vertiefung Kenntnisstand Kontaktbereich & Injektionsmittel, In-situ-Versuche (STROEFUN III), Teilprojekt A | TU Clausthal, Clausthal-Zellerfeld | 📖 68 |





- | | | | |
|--------------------|---|--|------|
| 02 E 11748B | Verbundprojekt: Strömungstechnischer Funktionsnachweis für Verschlussbauwerke und flüssigkeitsgestützte Abdichtung des Kontaktbereiches - Phase III: Vertiefung Kenntnisstand Kontaktbereich & Injektionsmittel, In-situ-Versuche (STROEFUN III), Teilprojekt B | Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e. V., Dresden | 📖 70 |
| 02 E 11759A | Verbundprojekt: Grimsel Felslabor: In-situ-Experimente zur Bentonit Langzeit-Stabilität und der Radionuklidmobilität an der Grenzfläche Bentonit - Kristallin (KOLLORADO-e3), Teilprojekt A | Friedrich-Schiller-Universität Jena | 📖 72 |
| 02 E 11759B | Verbundprojekt: Grimsel Felslabor: In-situ-Experimente zur Bentonit Langzeit-Stabilität und der Radionuklidmobilität an der Grenzfläche Bentonit - Kristallin (KOLLORADO-e3), Teilprojekt B | Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Eggenstein-Leopoldshafen | 📖 74 |
| 02 E 11759C | Verbundprojekt: Grimsel Felslabor: In-situ-Experimente zur Bentonit Langzeit-Stabilität und der Radionuklidmobilität an der Grenzfläche Bentonit - Kristallin (KOLLORADO-e3), Teilprojekt C | Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln | 📖 76 |
| 02 E 11769A | Verbundprojekt: MgO-Spritzbeton für Streckenverschlüsse für HAW-Endlager im Steinsalz (MgO-S3), Teilprojekt A | Technische Universität Bergakademie Freiberg | 📖 78 |
| 02 E 11769B | Verbundprojekt: MgO-Spritzbeton für Streckenverschlüsse für HAW-Endlager im Steinsalz (MgO-S3), Teilprojekt B | Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e. V., Dresden | 📖 80 |
| 02 E 11779 | MgO-Spritzbeton für Streckenverschlüsse für HAW-Endlager im Steinsalz, Qualitätssicherung mit Ultraschall (MgO-S3) | Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung (BAM), Berlin | 📖 82 |
| 02 E 11799A | Verbundprojekt: Vertikales hydraulisches Dichtsystem nach dem Sandwich-Prinzip - Hauptprojekt (SANDWICH-HP), Teilprojekt A | Karlsruher Institut für Technologie (KIT) | 📖 84 |
| 02 E 11799B | Verbundprojekt: Vertikales hydraulisches Dichtsystem nach dem Sandwich-Prinzip - Hauptprojekt (SANDWICH-HP), Teilprojekt B | Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln | 📖 86 |
| 02 E 11799C | Verbundprojekt: Vertikales hydraulisches Dichtsystem nach dem Sandwich-Prinzip - Hauptprojekt (SANDWICH-HP), Teilprojekt C | Technische Universität Bergakademie Freiberg | 📖 88 |
| 02 E 11819 | Mineralumwandlung und Sorption bei erhöhten Temperaturen in geklüfteten Kristallingesteinen und Barriermaterial (MUSE) | Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln | 📖 94 |
| 02 E 11839 | Entwicklung eines Leitfadens zur Auslegung und zum Nachweis von geotechnischen Barrieren für ein HAW Endlager in Salzformationen (RANGERS) | BGE Technology GmbH, Peine | 📖 98 |

02 E 11870A	Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt A	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln	📖 128
02 E 11870B	Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt B	Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e. V., Dresden	📖 130
02 E 11870C	Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt C	Universität Greifswald	📖 132
02 E 11870D	Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt D	TU München	📖 134
02 E 11870E	Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt E	Leibniz Universität Hannover	📖 136
02 E 11870F	Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt F	Leibniz Universität Hannover	📖 138
02 E 11880	Sicherheitsrelevante Untersuchungen zur Bentonitauf-sättigung (SIRUB)	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln	📖 140
02 E 11900	Langzeitsicherheit von Verschlussystemen in Schächten und Rampen im Vergleich (LARYSSA)	BGE Technology GmbH, Peine	📖 146
02 E 11911A	Verbundprojekt: Vorhersage der heterogenen Radionuklidsorption auf Kluft- und Störungsflächen in granitischen Gesteinen: Parametrisierung und Validierung verbesserter reaktiver Transportmodelle (WTZ-Granit), Teilprojekt A	Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e. V., Dresden	📖 148
02 E 11911B	Verbundprojekt: Vorhersage der heterogenen Radionuklidsorption auf Kluft- und Störungsflächen in granitischen Gesteinen: Parametrisierung und Validierung verbesserter reaktiver Transportmodelle (WTZ-Granit), Teilprojekt B	Friedrich-Schiller-Universität Jena	📖 150
02 E 11921A	Verbundprojekt: Untersuchungen zur SEParation von AMericiem aus hochradioaktiven Abfalllösungen (SEPAM), Teilprojekt A	Forschungszentrum Jülich GmbH	📖 152
02 E 11921B	Verbundprojekt: Untersuchungen zur SEParation von AMericiem aus hochradioaktiven Abfalllösungen (SEPAM), Teilprojekt B	Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Eggenstein-Leopoldshafen	📖 154
02 E 11951A	Verbundprojekt: Kompaktion von Salzgrus für den sicheren Einschluss - Phase 2 (KOMPASS II), Teilprojekt A	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln	📖 160
02 E 11951B	Verbundprojekt: Kompaktion von Salzgrus für den sicheren Einschluss - Phase 2 (KOMPASS II), Teilprojekt B	BGE Technology GmbH, Peine	📖 162

02 E 11951C	Verbundprojekt: Kompaktion von Salzgrus für den sicheren Einschluss - Phase 2 (KOMPASS II), Teilprojekt C	IfG Institut für Gebirgsmechanik GmbH, Leipzig	📖 164
02 E 11951D	Verbundprojekt: Kompaktion von Salzgrus für den sicheren Einschluss - Phase 2 (KOMPASS II), Teilprojekt D	TU Clausthal, Clausthal-Zellerfeld	📖 166
02 E 11961	Entwicklung eines salzgrusbasierten Versatzkonzepts unter der Option Rückholbarkeit - Phase 1 (SAVER)	Technische Universität Bergakademie Freiberg	📖 168
02 E 11971A	Verbundprojekt: Anwendbarkeit von Niedertemperatur-Salzschnmelzen für Verschlussmaßnahmen von Endlagern für radioaktiver Abfälle im Wirtsgestein Salz (SalVE), Teilprojekt A	Technische Universität Bergakademie Freiberg	📖 170
02 E 11971B	Verbundprojekt: Anwendbarkeit von Niedertemperatur-Salzschnmelzen für Verschlussmaßnahmen von Endlagern für radioaktiver Abfälle im Wirtsgestein Salz (SalVE), Teilprojekt B	BGE Technology GmbH, Peine	📖 172
02 E 11981A	Verbundprojekt: Implementierung eines Monitoring-systems zur Evaluierung der Korrosionsvorgänge an Behältermaterialien in Bentonit-basierten Endlagerkonzepten (IMKORB), Teilprojekt A	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln	📖 174
02 E 11981B	Verbundprojekt: Implementierung eines Monitoring-systems zur Evaluierung der Korrosionsvorgänge an Behältermaterialien in Bentonit-basierten Endlagerkonzepten (IMKORB), Teilprojekt B	Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Eggenstein-Leopoldshafen	📖 176
02 E 11981C	Verbundprojekt: Implementierung eines Monitoring-systems zur Evaluierung der Korrosionsvorgänge an Behältermaterialien in Bentonit-basierten Endlagerkonzepten (IMKORB), Teilprojekt C	Leibniz Universität Hannover	📖 178
02 E 12001A	Verbundprojekt: Sandwich Support Projekt 1: Heterogene Bentonithydratation (SANDWICH-SP1), Teilprojekt A	Karlsruher Institut für Technologie (KIT)	📖 182
02 E 12001B	Verbundprojekt: Sandwich Support Projekt 1: Heterogene Bentonithydratation (SANDWICH-SP1), Teilprojekt B	Ruhr-Universität Bochum	📖 184

C3 Sicherheitsnachweis

- | | | | |
|-------------|--|---|------|
| 02 E 11446A | Verbundprojekt: Weiterentwicklung und Qualifizierung der gebirgsmechanischen Modellierung für die HAW-Endlagerung im Steinsalz (WEIMOS), Teilprojekt A | Dr. Andreas Hampel,
Mainz | 📖 18 |
| 02 E 11446B | Verbundprojekt: Weiterentwicklung und Qualifizierung der gebirgsmechanischen Modellierung für die HAW-Endlagerung im Steinsalz (WEIMOS), Teilprojekt B | IfG Institut für Gebirgsmechanik
GmbH, Leipzig | 📖 20 |
| 02 E 11446C | Verbundprojekt: Weiterentwicklung und Qualifizierung der gebirgsmechanischen Modellierung für die HAW-Endlagerung im Steinsalz (WEIMOS), Teilprojekt C | Leibniz Universität
Hannover | 📖 22 |
| 02 E 11446D | Verbundprojekt: Weiterentwicklung und Qualifizierung der gebirgsmechanischen Modellierung für die HAW-Endlagerung im Steinsalz (WEIMOS), Teilprojekt D | TU Carolo-Wilhelmina zu Braunschweig | 📖 24 |
| 02 E 11446E | Verbundprojekt: Weiterentwicklung und Qualifizierung der gebirgsmechanischen Modellierung für die HAW-Endlagerung im Steinsalz (WEIMOS), Teilprojekt E | TU Clausthal,
Clausthal-Zellerfeld | 📖 26 |
| 02 E 11466 | Entwicklung von Rechenmodulen für die integrierte Modellierung von Transportprozessen im einschlusswirksamen Gebirgsbereich (RepoTREND+) | Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS)
gGmbH, Köln | 📖 28 |
| 02 E 11607A | Verbundprojekt: Verhalten langlebiger Spalt- und Aktivierungsprodukte im Nahfeld von Endlagern unterschiedlicher Wirtsgesteine und Möglichkeiten ihrer Rückhaltung (VESPA II), Teilprojekt A | Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS)
gGmbH, Köln | 📖 34 |
| 02 E 11607B | Verbundprojekt: Verhalten langlebiger Spalt- und Aktivierungsprodukte im Nahfeld von Endlagern unterschiedlicher Wirtsgesteine und Möglichkeiten ihrer Rückhaltung (VESPA II), Teilprojekt B | Helmholtz-Zentrum
Dresden-Rossendorf
e. V. | 📖 36 |
| 02 E 11607C | Verbundprojekt: Verhalten langlebiger Spalt- und Aktivierungsprodukte im Nahfeld von Endlagern unterschiedlicher Wirtsgesteine und Möglichkeiten ihrer Rückhaltung (VESPA II), Teilprojekt C | Sondervermögen
Großforschung beim
Karlsruher Institut
für Technologie
(KIT), Eggenstein-
Leopoldshafen | 📖 38 |
| 02 E 11607D | Verbundprojekt: Verhalten langlebiger Spalt- und Aktivierungsprodukte im Nahfeld von Endlagern unterschiedlicher Wirtsgesteine und Möglichkeiten ihrer Rückhaltung (VESPA II), Teilprojekt D | Forschungszentrum
Jülich GmbH | 📖 40 |

02 E 11658A	Verbundprojekt: Aktualisierung der Sicherheits- und Nachweismethodik für die HAW-Endlagerung im Tongestein in Deutschland (ANSICHT II), Teilprojekt A	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln	 54
02 E 11658B	Verbundprojekt: Aktualisierung der Sicherheits- und Nachweismethodik für die HAW-Endlagerung im Tongestein in Deutschland (ANSICHT II), Teilprojekt B	BGE Technology GmbH, Peine	 56
02 E 11668A	Verbundprojekt: Smart-K _d in der Langzeitsicherheitsanalyse - Anwendungen (SMILE), Teilprojekt A	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln	 58
02 E 11668B	Verbundprojekt: Smart-K _d in der Langzeitsicherheitsanalyse - Anwendungen (SMILE), Teilprojekt B	Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e. V.	 60
02 E 11668C	Verbundprojekt: Smart-K _d in der Langzeitsicherheitsanalyse - Anwendungen (SMILE), Teilprojekt C	Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Eggenstein-Leopoldshafen	 62
02 E 11809A	Verbundprojekt: Weiterentwicklung von d ^{3f++} : Hydrogeologische Modellierung im regionalen Maßstab (HYMNE), Teilprojekt A	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln	 90
02 E 11809B	Verbundprojekt: Weiterentwicklung von d ^{3f++} : Hydrogeologische Modellierung im regionalen Maßstab (HYMNE), Teilprojekt B	Johann Wolfgang Goethe-Universität Frankfurt am Main	 92
02 E 11850A	Verbundprojekt: Deutsch-chinesische Entsorgungsforschung – Pilotprojekt: Reanalysis of BRIUG THM Mock-up Test (ELF-China-Pilot), Teilprojekt A	Helmholtz-Zentrum für Umweltforschung GmbH – UFZ -, Leipzig	 100
02 E 11850B	Verbundprojekt: Deutsch-chinesische Entsorgungsforschung – Pilotprojekt: Reanalysis of BRIUG THM Mock-up Test (ELF-China-Pilot), Teilprojekt B	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln	 102
02 E 11850C	Verbundprojekt: Deutsch-chinesische Entsorgungsforschung – Pilotprojekt: Reanalysis of BRIUG THM Mock-up Test (ELF-China-Pilot), Teilprojekt C	Technische Universität Bergakademie Freiberg	 104
02 E 11850D	Verbundprojekt: Deutsch-chinesische Entsorgungsforschung – Pilotprojekt: Reanalysis of BRIUG THM Mock-up Test (ELF-China-Pilot), Teilprojekt D	TU Clausthal, Clausthal-Zellerfeld	 106
02 E 11850E	Verbundprojekt: Deutsch-chinesische Entsorgungsforschung – Pilotprojekt: Reanalysis of BRIUG THM Mock-up Test (ELF-China-Pilot), Teilprojekt E	Friedrich-Schiller Universität Jena	 108

02 E 11850F	Verbundprojekt: Deutsch-chinesische Entsorgungsforschung – Pilotprojekt: Reanalysis of BRIUG THM Mock-up Test (ELF-China-Pilot), Teilprojekt F	Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Eggenstein- Leopoldshafen	📖 110
02 E 11860A	Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt A	Johannes Gutenberg- Universität Mainz	📖 112
02 E 11860B	Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt B	Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e. V.	📖 114
02 E 11860C	Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt C	Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Eggenstein- Leopoldshafen	📖 116
02 E 11860D	Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt D	Universität des Saar- landes	📖 118
02 E 11860E	Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt E	TU München	📖 120
02 E 11860F	Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt F	Universität Potsdam	📖 122
02 E 11860G	Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt G	TU Dresden	📖 124
02 E 11860H	Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt H	Universität Heidel- berg	📖 126
02 E 11890A	Verbundprojekt: Entwicklung und Test eines erweiterten Hoek-Brown Stoffmodells zur Berücksichtigung anisotropen Festigkeitsverhaltens bei der Anwendung der Integritätskriterien für kristalline Wirtsgesteine (BARIK), Teilprojekt A	BGE Technology GmbH, Peine	📖 142
02 E 11890B	Verbundprojekt: Entwicklung und Test eines erweiterten Hoek-Brown Stoffmodells zur Berücksichtigung anisotropen Festigkeitsverhaltens bei der Anwendung der Integritätskriterien für kristalline Wirtsgesteine (BARIK), Teilprojekt B	Technische Universi- tät Bergakademie Freiberg	📖 144
02 E 11941	Wissenschaftliche Grundlagen zum Nachweis der Langzeitsicherheit von Endlagern (WiGru-9)	Gesellschaft für An- lagen- und Reaktor- sicherheit (GRS) gGmbH, Köln	📖 158


D Querschnittsaufgaben

D1 Wissens- und Kompetenzmanagement

D2 Sozio-technische Fragestellungen

02 E 11789	Wegemanagement bei der Entsorgung hoch radioaktiver Abfälle in Deutschland (WERA)	Öko-Institut. Institut für angewandte Ökologie e. V.	📖 188
02 E 11849A	Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt A	TU Clausthal, Clausthal-Zellerfeld	📖 190
02 E 11849B	Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt B	Christian-Albrechts-Universität zu Kiel	📖 192
02 E 11849C	Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt C	Freie Universität Berlin	📖 194
02 E 11849D	Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt D	Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Eggenstein-Leopoldshafen	📖 196
02 E 11849E	Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt E	Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Eggenstein-Leopoldshafen	📖 198
02 E 11849F	Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt F	Leibniz Universität Hannover	📖 200
02 E 11849G	Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt G	Öko-Institut. Institut für angewandte Ökologie e. V.	📖 202
02 E 11849H	Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt H	TU Berlin	📖 204
02 E 11849I	Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt I	TU Carolo-Wilhelmina zu Braunschweig	📖 206
02 E 11849J	Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt J	Universität Kassel	📖 208

D3 Kernmaterialüberwachung

02 W 6279 Neu- und Weiterentwicklung von Konzepten, Methoden und Techniken für die internationale Kernmaterialüberwachung, insbesondere im Rahmen der nuklearen Entsorgung (SAFEGUARDS-3) **Forschungszentrum Jülich**  210

2 Formalisierte Zwischenberichte

2.1 Vorhaben Bereich C1 – C3

Zuwendungsempfänger: Dr. Andreas Hampel, Grünberger Str. 56, 55129 Mainz		Förderkennzeichen: 02 E 11446A
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Weiterentwicklung und Qualifizierung der gebirgsmechanischen Modellierung für die HAW-Endlagerung im Steinsalz (WEIMOS), Teilprojekt A		
Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit Bereich C3: Sicherheitsnachweis, Feld: 3.1		
Laufzeit des Vorhabens: 01.04.2016 bis 30.09.2022	Berichtszeitraum: 01.07.2021 bis 31.12.2021	
Gesamtkosten des Vorhabens: 723.810,00 EUR	Projektleiter: 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 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 (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 Untertageszenarien das Finite-Differenzen-Programm FLAC3D (Itasca).

Im Berichtszeitraum erweiterte der ZE sein CDM-Stoffmodell um die Berücksichtigung des transienten Kriechens bei kleinen Deviatorspannungen unter ca. 6-8 MPa und überarbeitete die Modellierung der Spannungsabhängigkeit der Dilatanzentwicklung. Für das weiterentwickelte Stoffmodell bestimmte er Parameterkennwerte anhand von Labordaten aus zahlreichen Kriech- und Festigkeitsversuchen des IfG mit Steinsalz aus der WIPP und aus Verheilungsversuchen der TUC mit Steinsalz aus der Asse. Mit diesen führte der ZE Berechnungen der beiden Virtuellen Demonstratoren (VD) aus AP5 durch. Mit dem VD I wird der Rückgang der Schädigung und Dilatanz im Konturbereich einer Strecke nach dem Einbau eines Dammbauwerks simuliert. Mit dem VD II wird die Auswirkung einer starken Schädigung an der Kontur einer Strecke (Schädigungszone, DRZ: damaged rock zone) demonstriert. Mit Simulationen mit und ohne Berücksichtigung des auf Extensionsbelastungen zurückgehenden Schädigungsanteils wird dabei der Einfluss der Zugschädigung und des Zugversagens untersucht. Bei den Simulationen beider VD zeigt sich, dass das transiente Kriechen bei kleinen Spannungen einen erheblichen Einfluss nicht nur auf die Konvergenz untertägiger Hohlräume, sondern auch auf die Schädigungs- und Dilatanzentwicklung in der Schädigungszone um Hohlräume herum hat.

Der ZE hielt am 12.10.2021 auf dem Salt Mechanics Webinar I einen Vortrag zum Thema „Kriechen bei kleinen Deviatorspannungen“ und verfasste eine Veröffentlichung über die Arbeiten und Ergebnisse des Verbundes in AP5 zur SaltMech-X-Konferenz im Juli 2022 in Utrecht/NL.

Aufgrund der COVID-19-Pandemie konnten im Berichtszeitraum keine persönlichen Treffen der Projektpartner stattfinden. Abstimmungen zwischen den Projektpartnern sowie Präsentationen und Diskussionen der Ergebnisse erfolgten in Videobesprechungen.

4. Geplante Weiterarbeiten

Im Vordergrund der weiteren Arbeiten steht zunächst die Erstellung des Ergebnisberichtes zum Teilprojekt A des ZE. Anschließend verfasst der ZE den gemeinsamen Synthesebericht. Die Ergebnisberichte der Partner bilden zusammen mit dem Synthesebericht den Abschlussbericht zum Verbundprojekt WEIMOS.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: IfG Institut für Gebirgsmechanik GmbH, Friederikenstr. 60, 04279 Leipzig		Förderkennzeichen: 02 E 11446B
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Weiterentwicklung und Qualifizierung der gebirgsmechanischen Modellierung für die HAW-Endlagerung im Steinsalz (WEIMOS), Teilprojekt B		
Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit Bereich C3: Sicherheitsnachweis, Feld: 3.1		
Laufzeit des Vorhabens: 01.04.2016 bis 31.03.2022	Berichtszeitraum: 01.07.2021 bis 31.12.2021	
Gesamtkosten des Vorhabens: 1.005.576,00 EUR	Projektleiter: Dr. Lüdeling	

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, 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, hier fokussiert auf die flache Lagerung. 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 komplexer gebirgsmechanischer 3D-Modelle 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

Das IfG beteiligte sich an den Projektworkshops 29 bis 31, die im Berichtszeitraum online stattfanden.

Der erste virtuelle Demonstrator wurde mit dem Stoffgesetz IfG-Minkley simuliert. Ähnlich wie beim zweiten Demonstrator ergeben sich Verschiebungen von Stoß und Firste im Bereich mehrerer Dezimeter. Im Bereich des steifen Streckenverschlusses kommt die Verformung zum Erliegen, und es baut sich wieder ein isotroper Spannungszustand auf, der in guter Näherung dem lithostatischen Grundzustand entspricht. Plastische Schädigung tritt vor allem in den Streckenecken auf, die entsprechend der realen Auffahrung mit einer Teilschnittmaschine mit einem Radius von ca. 20 cm ausgerundet wurden. Wie aufgrund der Geometrie und Lastsituation zu erwarten war (und wie in situ beobachtet wird), ist die Schädigung weniger intensiv als beim zweiten Demonstrator.

Darüber hinaus wurden beide Demonstratoren mit beiden Stoffgesetzen in ihrer jeweils aktuellen Form neu berechnet und die Ergebnisse als Zuarbeit dem Projektkoordinator Andreas Hampel zu Verfügung gestellt, der als Hauptautor die WEIMOS-Veröffentlichung zu den virtuellen Demonstratoren bei der Konferenz SaltMech X im Sommer 2022 erstellt. Das Papier befindet sich derzeit in der Begutachtungsphase.

Im AP1 wurde der Langzeittemperaturwechselversuch TCC34 fortgesetzt. Die Laststufe von 4 MPa wurde beibehalten; im Berichtszeitraum wurde die Temperatur zunächst von 333 K auf 353 K erhöht, und nach einer Kriechphase von etwa 145 Tagen kurz vor Weihnachten weiter auf 373 K. Die neuen Phasen wiederholen damit Randbedingungen, die die Probe früher bereits durchlaufen hatte, damals in Schritten verringerter Temperatur. Die zweite Phase bei 353 K zeigt eine kurze transiente Phase (ca. 20 Tage) und danach eine stationäre Rate, die gut mit der vorher gemessenen übereinstimmt. (Die neue Phase bei 373 K kann noch nicht ausgewertet werden.) Die grundlegende Versuchsführung wird also bestätigt; das Auftreten einer (wenn auch kleinen) transienten Phase könnte auf die Reaktivierung von Versetzungsmechanismen bei höheren Temperaturen hindeuten.

Die im Projekt gewonnenen Erkenntnisse zum Kriechen bei kleinen Spannungen und insbesondere der Langzeitversuch TCC34 dienen auch als Grundlage für einen WEIMOS-Beitrag zur SaltMech X, die federführend vom IfG erstellt wird.

Das IfG hat ebenfalls Beiträge zum SaltMech-Papier zur Verheilung und Schädigungsrückbildung geleistet; hier sind die Partner der TU Clausthal die Hauptautoren.

4. Geplante Weiterarbeiten

Das Forschungsprojekt wird im Frühjahr 2022 abgeschlossen. In der verbleibenden Zeit steht die Erstellung der Abschlussberichte im Vordergrund.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Leibniz Universität Hannover, Welfengarten 1, 30167 Hannover		Förderkennzeichen: 02 E 11446C
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Weiterentwicklung und Qualifizierung der gebirgsmechanischen Modellierung für die HAW-Endlagerung im Steinsalz (WEIMOS), Teilprojekt C		
Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit Bereich C3: Sicherheitsnachweis, Feld: 3.1		
Laufzeit des Vorhabens: 01.04.2016 bis 31.03.2022	Berichtszeitraum: 01.07.2021 bis 31.12.2021	
Gesamtkosten des Vorhabens: 526.725,00 EUR	Projektleiter: Dr. Zapf	

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 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

In dem Berichtszeitraum hat der Zuwendungsempfänger (ZE) weitere Untersuchungen am virtuellen Demonstrator II sowie Vergleiche der Berechnungsergebnisse aus den Simulationsberechnungen zum virtuellen Demonstrator I mit denen aus den Simulationsberechnungen zum virtuellen Demonstrator II durchgeführt und die Ergebnisse in Online-Workshops vorgestellt und mit den Projektpartnern diskutiert. Weiterhin hat der ZE an seinem Endbericht zum Vorhaben gearbeitet. Aufgrund der COVID-19-Pandemie konnten im Berichtszeitraum keine persönlichen Treffen der Projektpartner stattfinden. Abstimmungen zwischen den Projektpartnern sowie Präsentationen und Diskussionen der Ergebnisse erfolgten in Videobesprechungen.

4. Geplante Weiterarbeiten

Die Untersuchungen am virtuellen Demonstrator II sollen abgeschlossen und die Ergebnisse in Online-Workshops vorgestellt und mit den Projektpartnern diskutiert werden. Weiterhin ist geplant den Endbericht zum Vorhaben fertig zu stellen.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Technische Universität Carolo-Wilhelmina zu Braunschweig, Universitätsplatz 2, 38106 Braunschweig		Förderkennzeichen: 02 E 11446D
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Weiterentwicklung und Qualifizierung der gebirgsmechanischen Modellierung für die HAW-Endlagerung im Steinsalz (WEIMOS), Teilprojekt D		
Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit Bereich C3: Sicherheitsnachweis, Feld: 3.1		
Laufzeit des Vorhabens: 01.04.2016 bis 31.03.2022	Berichtszeitraum: 01.07.2021 bis 31.12.2021	
Gesamtkosten des Vorhabens: 427.816,00 EUR	Projektleiter: 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 (ZE) 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 wurde der Verheilungstherm des Stoffmodells TUBSSalt weiterentwickelt, da bei der Berechnung des ersten virtuellen Demonstrators zuvor eine, im Vergleich zu den Ergebnissen der Projektpartner, zu hohe Verheilungsrate ermittelt wurde. Es wurde eine neue Formulierung für den Parameter η^v , der die Viskosität der Verheilung beschreibt, implementiert und anhand der Versuchsergebnisse validiert. In Vorbereitung einer Veröffentlichung im Rahmen der SaltMechX 2022 wurde ein Vergleich der Verheilungsraten aller Partner vorgenommen. Es zeigt sich, dass mit der neuen Formulierung des Stoffmodells TUBSSalt eine gute Übereinstimmung mit den Raten der restlichen Partner erreicht wird.

Des Weiteren wurde an einer Anpassung des Stoffmodells hinsichtlich der Berechnung der schädigungsinduzierten Volumendehnung gearbeitet. Im 1. Halbjahr zeigte sich bei dem Vergleich der Ergebnisse der Projektpartner untereinander, dass mit dem Stoffmodell TUBSSalt vergleichsweise geringe Werte für die schädigungsinduzierte Dilatanz berechnet werden. Die Arbeiten hierzu dauern noch an.

Im Rahmen der SaltMechX 2022 werden drei Berichte aus dem Verbundprojekt WEIMOS veröffentlicht. Der ZE hat den Hauptautoren der Veröffentlichungen zugearbeitet.

Im Berichtszeitraum konnten aufgrund der COVID-19-Pandemie keine persönlichen Treffen stattfinden. Die Abstimmung zwischen den Projektpartnern erfolgte, wie auch in den vorherigen Halbjahren, in Form von virtuellen Workshops.

4. Geplante Weiterarbeiten

Im Vordergrund der weiteren Arbeiten steht die Anpassung des Stoffmodells hinsichtlich der Berechnung der schädigungsinduzierten Volumendehnung. Abschließend ist der Abschlussbericht zu verfassen.

Sofern aufgrund der COVID-19-Pandemie weiterhin keine persönlichen Treffen stattfinden können, werden weitere digitale Workshops geplant.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Technische Universität Clausthal, Adolph-Roemer-Str. 2a, 38678 Clausthal-Zellerfeld		Förderkennzeichen: 02 E 11446E
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Weiterentwicklung und Qualifizierung der gebirgsmechanischen Modellierung für die HAW-Endlagerung im Steinsalz (WEIMOS), Teilprojekt E		
Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit Bereich C3: Sicherheitsnachweis, Feld: 3.1		
Laufzeit des Vorhabens: 01.04.2016 bis 31.03.2022	Berichtszeitraum: 01.07.2021 bis 31.12.2021	
Gesamtkosten des Vorhabens: 784.171,00 EUR	Projektleiter: 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

Aufgrund der COVID-19-Pandemie führten die Projektpartner im Berichtszeitraum an 16. Juli, 15. September und 05. November die Projekt-Workshops 29 bis 31 online durch. Auf den Projekt-Workshops stellte der Zuwendungsempfänger aktuelle Projektthemen mit Fokussierung auf Arbeiten in AP2 und AP5 vor.

Aufgrund der Mutterschutzzeit der projektbearbeitenden Mitarbeiterin des Zuwendungsempfängers wurden dessen Arbeiten im Berichtszeitraum im Juli zunächst nur im AP2, also im Bereich der Laborversuche zum Verheilungsverhalten von Steinsalz weitergeführt. Seit August 2021 konnten durch Mitarbeiterverschiebungen beim Zuwendungsempfänger auch die Arbeiten im AP5, also im Bereich der numerischen Simulationen an den virtuellen Demonstratoren fortgeführt werden.

Für den Berichtszeitraum sind insgesamt drei beim Zuwendungsempfänger durchgeführte Laborversuchsserien mit jeweils 4 parallel untersuchten Prüfkörpern zu erwähnen. Es wurde zunächst die bereits im vorherigen Berichtszeitraum begonnene Serie 4e) mit einer parallelen Untersuchung von 2 Asse-Prüfkörpern und 2 Wipp-Prüfkörpern abgeschlossen, wobei sich ein sehr unterschiedliches Schädigungsverhalten der beiden Materialtypen gezeigt hat. In der anschließenden Serie 4f) wurden 4 weitere Wipp-Prüfkörper untersucht, von denen allerdings 3 bereits sehr frühzeitig in der Schädigungsphase zerbrochen sind. Aus diesem Grund wurde die Serie 4f) vorzeitig abgebrochen und mit der Serie 4g) begonnen, in der ebenfalls 4 Wipp-Prüfkörper untersucht wurden, diesmal allerdings mit einer vorsichtigeren Belastung während der Schädigungsphase. Dennoch sind auch bei der Serie 4g) wieder 3 Prüfkörper sehr frühzeitig in der Schädigungsphase zerbrochen. Die Serie 4g) wird dennoch weiterhin fortgesetzt, um das Verheilungsverhalten des verbleibenden Prüfkörpers zu untersuchen. Die erhaltenen Laborergebnisse der Serien 4e), 4f) und 4g) wurden vom Zuwendungsempfänger auf den Projekt-Workshops präsentiert und diskutiert. Zusammenfassend lässt sich sagen, dass die Wipp-Prüfkörper bei gleichen Belastungen im Vergleich zu den Asse-Prüfkörpern ein deutlich heterogeneres Materialverhalten aufweisen, insbesondere in Bezug auf das Schädigungsverhalten.

Im Rahmen des AP5 sind im Berichtszeitraum beim Zuwendungsempfänger die numerischen Simulationen an den beiden virtuellen Demonstratoren durchgeführt worden.

Vom Zuwendungsempfänger ist während des Berichtszeitraums in Zusammenarbeit mit den Projektpartnern ein WEIMOS-bezogener Beitrag zur SaltMechX-Konferenz verfasst und zum Review eingereicht worden. Dieser Beitrag betrachtet die im Projekt durchgeführten Arbeiten im Hinblick auf das Verheilungsverhalten von Steinsalz.

4. Geplante Weiterarbeiten

Die Versuchsserie 4g) wird noch einige Wochen in den nächsten Berichtszeitraum fortgeführt, um das Verheilungsverhalten des verbleibenden Wipp-Prüfkörpers zu untersuchen. Zudem werden einzelne ausgewählte numerische Simulationen mit dem im Rahmen des Projektes weiterentwickelten Stoffmodells Lux/Wolters/Lerche nochmals durchgeführt. Ein zusammenfassender Einzelbericht zu den beim Zuwendungsempfänger durchgeführten Arbeiten wird erstellt.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 11466	
Vorhabensbezeichnung: Entwicklung von Rechenmodulen für die integrierte Modellierung von Transportprozessen im einschlusswirksamen Gebirgsbereich (RepoTREND+)			
Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit Bereich C3: Sicherheitsnachweis, Feld: 3.3			
Laufzeit des Vorhabens: 01.04.2016 bis 31.03.2022		Berichtszeitraum: 01.07.2021 bis 31.12.2021	
Gesamtkosten des Vorhabens: 2.758.255,00 EUR		Projektleiter: 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

- AP1: Anforderungsanalyse und Wissensmanagement.
Anforderungen werden ermittelt, spezifiziert, analysiert, strukturiert, abgestimmt und bewertet. Das Wissensmanagement umfasst sowohl interne Maßnahmen (wie Know-How-Transfer durch interne Diskussionsrunden) als auch das Einbeziehen des Know-Hows von externen Experten (z. B. durch die Teilnahme an fachlichen Konferenzen).
- AP2: Vorarbeiten für die Codeentwicklung.
Neue Konzepte und Modelle müssen erstellt werden: konzeptionelles, mathematisches und numerisches Modell des Nahfeldmoduls, Entwurf der Softwarearchitektur, Entwurf einzelner Programmkomponenten, Optimierungskonzepte.
- AP3: Codeentwicklung.
Umsetzung der in AP2 erarbeiteten Konzepte in einen Programmcode.
- AP4: Test, Qualitätssicherung, Dokumentation.
Umfangreiche Tests werden in allen Programmentwicklungsphasen durchgeführt. Die folgenden QS-Maßnahmen werden umgesetzt: Standardisierung der Arbeitsprozesse, Versions- und Konfigurationsmanagement, Release-Freigabe, Bugtracking, Lokalisierung von Problemen, Programmkommentare, Konventionen, Review des Programmcodes. Die gesamte Entwicklung über alle Phasen wird ausführlich dokumentiert.
- AP5: Verfolgung von Anforderungen aus aktuell laufenden FuE-Projekten.
Die Anforderungen aus den aktuell laufenden FuE-Projekten werden aufgenommen und so weit analysiert, dass eine Entscheidung getroffen werden kann, ob eine Anforderung bei der aktuellen Entwicklung berücksichtigt werden kann oder später, im Rahmen eines separaten Projekts bzw. Arbeitspakets, realisiert werden soll.
- AP6: Berichte zum Projektfortschritt.
Alle durchgeführten Arbeiten und erzielten Ergebnisse werden in Halbjahres- und Jahresberichten sowie im Abschlussbericht dokumentiert.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1:

Zur Generierung eines Rechengitters für ein Modellgebiet wird zurzeit der Gittergenerator blockMesh verwendet, der wenig benutzerfreundlich ist. Ein benutzerfreundlicher Gittergenerator soll blockMesh ersetzen oder als Vorbereitungstool für blockMesh benutzt werden. Es wurden Anforderungen erfasst, die durch die endlagerspezifische Thematik unbedingt erfüllt werden müssen. Insbesondere handelt es sich um folgende Anforderungen:

- Der Benutzer muss volle Kontrolle über die Struktur eines Rechengitters haben.
- Es muss möglich sein, Finite-Volumen-Rechengitter mit unterschiedlichen Zellenformen zu bilden sowie unterschiedliche Zellenformen innerhalb eines Rechengitters zu kombinieren.
- Eine Verknüpfung von Rechengitterbereichen mit den Parametern, die diese Bereiche charakterisieren, muss möglich sein.

Es wurden mehrere Gittergeneratoren evaluiert. Ein Tool mit den erforderlichen Eigenschaften und Funktionalitäten wurde bislang nicht gefunden; es ist davon auszugehen, dass eine Neuentwicklung erforderlich ist.

AP2:

Ein Konzept zum Wechsel der Primärvariablen beim Systemzustandswechsel wurde entwickelt. Die Konzepte zum Update der Systemparameter, zur Zeitschrittsteuerung und Datenausgabe wurden dementsprechend angepasst.

Das Konzept zum numerischen Berechnen von Ableitungen wurde modifiziert.

Die XENIA-Module, die für die Definition eines Nahfeld-Rechenlaufs erforderlich sind, wurden weiterentwickelt.

AP3:

Die Umsetzung von bereits existierenden Konzepten wurde fortgesetzt. Speziell folgende Konzepte wurden umgesetzt:

- Wechsel der Primärvariablen beim Systemzustandswechsel (einphasig/zweiphasig),
- Dadurch erforderliche Anpassung von mehreren Konzepten wie: Parameteraktualisierung, Zeitschrittsteuerung, Daten(zwischen)speicherung, Datenausgabe, Randbedingungen, Berechnung von Massenbilanzen...,
- Integration von Diffusion in die Strömungsgleichungen,
- Modifikation der numerischen Berechnung von Ableitungen.

Das Werkzeug RepoSTAR wurde überarbeitet und erweitert. Die Methode PAWN wurde als neues Verfahren zur Sensitivitätsanalyse implementiert. Dafür wurde ein R-Skript verfasst, getestet und über die Bibliothek SimLab 4 angebunden. Die Bedienoberfläche RepoSUN wurde entsprechend umgearbeitet. Da die neue Methode zusätzliche Parameter benötigt, die nicht bei jeder Analyse mit Standardwerten belegt werden können, wurde die Möglichkeit geschaffen, sogenannte Experteneinstellungen zu definieren, die auf Anforderung eingelesen werden können und vorgegebene Standardwerte überschreiben. Diese Einstellungen können ebenfalls über die neue Version der Bedienoberfläche bearbeitet werden.

Im Rahmen der Codepflege bereits vorhandener Datenstrukturen in NaTREND wurden einige Korrekturen und Erweiterungen vorgenommen.

AP4:

Es wurden umfangreiche Vergleichsrechnungen insbesondere bezüglich des Basisprozesses Zwei-Phasen-Fluss durchgeführt. Die vorhandene Bibliothek von automatischen Testfällen wurde entsprechend der aktuellen Entwicklung angepasst und durch neue Testfälle erweitert.

In der graphischen Benutzeroberfläche XENIA umgesetzte neue Anforderungen wurden ausführlich getestet.

Die entwickelten Konzepte, die zugrunde liegenden Entscheidungen sowie der Projektfortschritt wurden dokumentiert.

AP6:

Der vorliegende Bericht wurde erstellt.

4. Geplante Weiterarbeiten

Im nächsten Halbjahr soll überwiegend an AP3 und AP4 gearbeitet werden, wobei der Schwerpunkt bei der Umsetzung des Schadstofftransports liegen soll.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Auftragnehmer: BGE Technology GmbH, Eschenstr. 55, 31224 Peine		Förderkennzeichen: 02 E 11577A	
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Sicherheitsanalytische Untersuchungen zu Endlagersystemen im Kristallin (SUSE), Teilprojekt A			
Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte, Feld: 2.3			
Laufzeit des Vorhabens: 01.06.2017 bis 31.05.2023		Berichtszeitraum: 01.07.2021 bis 31.12.2021	
Gesamtkosten des Vorhabens: 1.0502.960,74 EUR		Projektleiter: 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 Klüft- und Störungszonennetzwerkes präzisiert.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Bemessung des geotechnischen Verschlussystems
- AP2: Gesteineignungsklassifikationen als Positionierungskriterien für Dichtelemente, Bohrlöcher und Auffahrungen im Kristallin
- AP3: Charakterisierung eines Klüft- 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
- AP7: Unterstützung bei der methodischen Planung des Untertagelabors und Spezifizierung des In-Situ-Forschungs- und Entwicklungsbedarfs

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP5.5: Ziel dieses APs ist der Vergleich mehrerer Modellierungsansätze, die zur Simulation von Strömungs- und Transportprozessen in geklüfteten Gesteinen typischerweise verwendet werden. Durch den Vergleich sollen Ungewissheiten charakterisiert werden, die bei der Implementierung des numerischen Modells aus dem geologischen Modell entstehen und mit dem entsprechenden Modellierungsansatz verbunden sind. Die zu diesem Zweck im ersten Halbjahr spezifizierten Benchmarkmodellierungen möchte die BGETEC mit drei unterschiedlichen Ansätzen durchführen. Als erster Ansatz soll der in der Vergangenheit getestete fracture continuum Ansatz zum Einsatz kommen. Bevor allerdings die Eignung des Ansatzes im Rahmen der Benchmarkmodellierungen dokumentiert werden kann, mussten im Berichtszeitraum weiterführende Testrechnungen mit dem Ansatz in den Simulationscodes FLAC3D und OpenGeoSys (OGS) durchgeführt werden. Die Testrechnungen sahen eine systematische Überprüfung verschiedener Einflussgrößen vor, wie z. B. Einfluss der hydraulischen Randbedingungen, der Elementgröße oder Abweichungen vom orthogonalen, äquidistant strukturierten Gitter (würfelförmige Elemente). Die Berechnungen mit FLAC3D sind abgeschlossen und zeigen, dass bei Verwendung anisotroper Permeabilitätswerte sowie würfelförmiger Elemente eine gute Übereinstimmung mit der Analytik besteht. Bei dem zweiten Ansatz handelt es sich um einen sog. Upscaling-Ansatz, der am Los Alamos National Laboratory (LANL) entwickelt wurde. Das von LANL entwickelte Python-Skript mapDFN nutzt stochastische Klufnetze und bildet diese auf ein regelmäßiges Kontinuums-gitter ab. Im Berichtszeitraum wurde an der Schnittstelle zwischen mapDFN und dem zu verwendeten Rechencode OGS gearbeitet, welcher die Daten aus mapDFN für OGS verfügbar macht. Bei dem dritten Ansatz handelt es sich um einen DFN-basierten Ansatz, der in Zusammenarbeit mit einem deutschen Universitäts-partner entwickelt wird und in OGS umgesetzt wird. Zum Jahresende konnte der erste Rechenfall auf Basis des DFN-basierten Ansatzes erfolgreich umgesetzt werden.

Allgemeines: Neben kleineren Arbeitsgesprächen fand unter Moderation der BGETEC am 27.09.2021 ein Projektgespräch der deutschen und russischen Projektpartner (NO.RAO und IBRAE) statt. Auf der Workshop-artigen Veranstaltungen fanden insgesamt 14 Vorträge zu den Bereichen geologischen Modellbildung, Laboruntersuchungen, numerische Modellierungen, Softwarepakete VIRTUS/Pulse sowie Explorationsmethoden statt. In enger Anlehnung an das SUSE-Arbeitsprogramm wurden erste Arbeitsergebnisse diskutiert.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP2: Die geplanten Arbeiten zur Überprüfung, ob eine Anwendbarkeit gängiger Gesteinsklassifikationen auch in deutschen Endlagerkonzepten im Kristallin sinnvoll ist, soll fortgeführt und an einem praktischen Beispiel gezeigt werden.

AP5.4: Die mit dem fracture continuum Ansatz beschriebenen Testrechnungen, als Grundlage für die Durchführung der Benchmarkmodellierungen, sollen mit OGS fortgeführt werden. Des Weiteren sind Erweiterungen des Ansatzes im Hinblick auf Transportmodellierungen geplant.

AP5.5: Im Rahmen zukünftiger Berechnungen sollen die Benchmarkberechnungen mit den genannten Modellierungsansätzen fortgeführt werden. Dabei ist ein enger Austausch mit dem russischen Projektpartner geplant, der zudem mit eigenen Modellierungsansätzen an den Benchmarkberechnungen mitwirkt.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 11577B
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Sicherheitsanalytische Untersuchungen zu Endlagersystemen im Kristallin (SUSE), Teilprojekt B		
Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte, Feld: 2.3		
Laufzeit des Vorhabens: 01.06.2017 bis 31.05.2023	Berichtszeitraum: 01.07.2021 bis 31.12.2021	
Gesamtkosten des Vorhabens: 1.704.840,00 EUR	Projektleiter: 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 Störungszonennetzwerkes präzisiert. Auf dieser Grundlage werden mit den Programmen d^{3f++} 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: 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
- AP7: Unterstützung bei der methodischen Planung des Untertagelabors und Spezifizierung des In-situ-Forschungs- und Entwicklungsbedarfs

Die GRS ist federführend in den AP4 und AP5.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Auch im zweiten Halbjahr 2021 musste der fachliche Austausch zwischen den deutschen Partnern und mit den russischen Partnern weitgehend online erfolgen. Projekttreffen zwischen den deutschen Partnern fanden am 02.07.2021 und am 28.09.2021 statt, drei weitere Treffen zur Diskussion der Grundwasserströmungs- und Transportmodelle am 09.07.2021, am 14.07.2021 (gemeinsam mit UAN TU BAF) und am 21.10.2021. In einem Online Meeting mit NO.RAO und IBRAE am 27.09.2021 wurden Arbeitsergebnisse und weitere geplante Arbeiten präsentiert und diskutiert.

Am 05. und 06. Oktober 2019 fand in Moskau die 11. Koordinationssitzung der Expertengruppe zur wissenschaftlich-technischen Zusammenarbeit auf dem Gebiet der Reaktorsicherheits- und Entsorgungsforschung (BMW i – Rosatom) u. a. unter Beteiligung von BGR, BGE Technology und GRS statt. Im Rahmen dieser Sitzung wurden auch Arbeitsergebnisse und mögliche weitere Kooperationen mit IBRAE und IGEM RAS diskutiert.

AP4: Die Extraktionen zwecks Bestimmung der K_d -Werte für Cs, Sr, Ba, Ni, Eu, Sm, Gd, Nd, I, Se und U wurden mit der 0,1 N HCl für den russischen Gneis und den alterierten russischen Gneis durchgeführt.

AP5: Weiterführende Testrechnungen mit dem fracture continuum Ansatz und weiteren Ansätzen zur Kluftherepräsentation in den eingesetzten Rechencodes (FLAC3D, OGS durch BGE TECHNOLOGY, d^{3f++} durch GRS) wurden in Vorbereitung der Durchführung der Benchmark-Rechnungen durchgeführt. Diese Testrechnungen zielten auf eine systematische Überprüfung verschiedener Einflussgrößen ab, wie z. B. Einfluss der hydraulischen Randbedingungen, der Elementgröße und der Elementdegeneration. Nach Auswertung der Ergebnisse wurde festgelegt, dass GRS für die Benchmark-Rechnungen auch den Oda-Ansatz verwenden wird, bei dem die Permeabilitäten des Klufnetzwerkes aus einem DFN-Modell auf ein gleichmäßiges Gitter übertragen werden. Die technische Umsetzbarkeit dieses Vorgehens wurde anhand von Beispielmodellen getestet und bestätigt.

AP7: Der von russischer Seite übermittelte Beispieldatensatz einer Modellrechnung für ein geplantes thermisch-mechanisches Experiment im URL Yeniseysky wurde mit VIRTUS visualisiert. Weitere Möglichkeiten zur Zusammenarbeit bei der Integration und visuellen Darstellung von Rechenergebnissen mit den Programmen PULSE (IBRAE) und VIRTUS (GRS) wurden diskutiert.

4. Geplante Weiterarbeiten

Ein Projekttreffen der deutschen Partner ist für Februar 2022 geplant. Weitere fachliche Online Meetings zwischen den deutschen und russischen Partnern werden abgestimmt.

AP4: Durchführung von ICP-MS- und BET-Messungen im Rahmen der Sorptionsversuche

AP5: Abschluss der vorbereitenden Testrechnungen; Durchführung der Benchmark-Modellrechnungen; Weiterführung der grundlegenden Arbeiten zur Erweiterung des Ansatzes im Hinblick auf Transportmodellierungen.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 11607A
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Verhalten langlebiger Spalt- und Aktivierungsprodukte im Nahfeld von Endlagern unterschiedlicher Wirtsgesteine und Möglichkeiten ihrer Rückhaltung (VESPA II), Teilprojekt A		
Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit Bereich C3: Sicherheitsnachweis, Feld: 3.1		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2017 bis 30.06.2022	Berichtszeitraum: 01.07.2021 bis 31.12.2021	
Gesamtkosten des Vorhabens: 1.107.813,00 EUR	Projektleiter: Dr. Hagemann	

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

Im Berichtszeitraum wurden Löslichkeitsversuche zur Untersuchung eines löslichkeitserhöhenden Effekts von Pb^{II} , Ni^{II} , Pd^{II} und Sn^{IV} in calciumreichen Lösungen über einen pcH von 8 bis 12 geplant und angesetzt. Nach Einstellung eines stabilen pH-Wertes, wird die Entwicklung der Konzentration der genannten Metalle in Lösung über einen Zeitraum von 6 Monaten beobachtet. Beprobungen nach 30 und 60 d wurden bereits vorgenommen und zeigten bei Blei und Zinn eine deutliche Steigerung der experimentellen gegenüber den modellierten Löslichkeiten oberhalb eines pcH von 10,5. Die 2. Probenahme nach 60 d zeigte eine Zunahme bei den höchsten experimentellen pH-Werten, jedoch eine Abnahme bei geringeren pH-Werten. Die Bildung von ternären Ca-Komplexen ist eine mögliche Erklärung hierfür, zur Bestätigung dieser Hypothese sind aber noch weitere Versuche nötig.

Die Versuche zur Bestimmung des Reduktionsverhaltens von Se in salinaren Lösungen wurden inzwischen nach 7, 30 und 60 d beprobt. Die Untersuchungen sollen zeigen, unter welchen Bedingungen und mit welcher Geschwindigkeit Selenit und Selenat durch Reaktion mit metallischem Eisen sowie Fe(II)-haltigen Korrosionsprodukten (Hibbingit, Chukanovit) reduziert werden. Die Se-Konzentrationen in Lösung zeigen, dass die Konzentration nach 7 und 30 d nach Zugabe einer Selenatlösung sich nur geringfügig von der Anfangskonzentration verringert haben. Bei Zugabe einer Selenitlösung hingegen, ist die Se-Konzentration nach 7 d bereits deutlich reduziert ($< 25\%$ der Anfangskonzentration) und ist nach 30 d nochmals deutlich herabgesetzt. Dies trifft auf alle Lösungen zu, die ein Fe-Plättchen enthalten. Bei Abwesenheit von metallischem Eisen war die Abnahme der Se-Konzentration 7 d nach der Selenitzugabe sogar noch größer, als wenn ein Eisen-Plättchen mit der Lösung in Kontakt war.

4. Geplante Weiterarbeiten

Die Löslichkeitsversuche zur Untersuchung eines löslichkeitserhöhenden Effekts von Pb^{II} , Ni^{II} , Pd^{II} und Sn^{IV} in calciumreichen Lösungen werden zu Ende geführt. Zur Bestätigung der Hypothese sollen noch weitere Versuche bei einem pcH von 10-12 und unterschiedlichen Ca-Konzentration durchgeführt werden.

Die Versuche zur Reduktion von Selenit und Selenat werden fortgeführt und weiterhin der zeitliche Verlauf der Se-Konzentration beobachtet. Zusätzlich werden die Korrosionsprodukte und die gebildeten Selenspezies analysiert werden.

Das Messsystem zur Untersuchung der Speziation von Seleniden in der Glove Box wird aufgebaut und die auftretenden Spezies im pH-Verlauf untersucht.

Durchführung einer vergleichenden Modellierung von Ausbreitung und Rückhaltung langlebiger Spalt- und Aktivierungsprodukten mit den Erkenntnissen aller Partner von VESPA II.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e. V., Bautzner Landstr. 400, 01328 Dresden		Förderkennzeichen: 02 E 11607B
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Verhalten langlebiger Spalt- und Aktivierungsprodukte im Nahfeld von Endlagern unterschiedlicher Wirtsgesteine und Möglichkeiten ihrer Rückhaltung (VESPA II), Teilprojekt B		
Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit Bereich C3: Sicherheitsnachweis, Feld: 3.1		
Laufzeit des Vorhabens: 01.09.2017 bis 30.06.2022	Berichtszeitraum: 01.07.2021 bis 31.12.2021	
Gesamtkosten des Vorhabens: 687.696,00 EUR	Projektleiter: 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}C , ^{79}Se , ^{129}I und ^{99}Tc in Langzeitsicherheitsnachweisen angenommen werden, abzubauen. Ziel des Teilvorhabens des HZDR ist die Identifikation von Rückhalteprozessen für das Spaltprodukt ^{99}Tc und im geringeren Umfang für ^{79}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 RES³T eingebunden. Ein weiteres Ziel stellt die Untersuchung und Charakterisierung der relevanten niederen Oxidationsstufen des ^{99}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:

- Die EXAFS-Daten von Tc-beladenen Grünrost-Mineralproben wurden analysiert. Zwei verschiedene Komponenten können durch lineare Kombination der experimentellen Daten beschrieben werden. Die erste Komponente tritt vor allem bei $\text{pH} < 6$ auf und wird als Tc(IV)-

Monomer, der über Kanten und Ecken an der Ferrihydritoberfläche gebunden ist, interpretiert. Die zweite Komponente dominiert bei $\text{pH} > 6$ und kann als Tc(IV)-Dimere, die über Kanten und Ecken der Ferrihydritoberfläche gebunden sind, beschrieben werden. Die Analyse dieser Daten ist diffizil. Obwohl die Komponenten die erhaltenen experimentellen Daten gut beschreiben, können wir nicht ausschließen, dass auch Tc(IV) Oberflächenkomplexe mit anderen Fe(III)-Mineralen gebildet werden.

- Elektrochemische Methoden wurden angewandt, um die Menge an S(-II) und anderen Oxydationsprodukten, z. B. Sulfit und Sulfat, zu bestimmen. Dies ist von größter Bedeutung für die Charakterisierung und Quantifizierung der Sulfidoxidationsprodukte nach der Reaktion mit Tc(VII).

AP2:

- Eine neue spektro-elektrochemische Versuchsanordnung wurde in einer mobilen Inertgas-Handschuhbox aufgebaut, die zukünftig nur für diese Experimente verwendet wird.

AP3:

- Weitergabe der bisher erhaltenen Sorptionsdaten an den Projektkoordinator GRS.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP1:

- Weitere Untersuchungen des Tc Rückhalts an S(-II) vorsorbiertem Aluminiumoxid unter Berücksichtigung weiterer Parameter, z. B. pH, Ionenstärke, [S(-II)], [Tc].
- Identifizierung der molekularen Strukturen, die für die Tc-Immobilisierung durch Sn(II) und S(-II) an Aluminiumoxid verantwortlich sind.
- Erstellung eines Manuskriptes zur Tc-Retention an Grünrost.

AP2:

- Einreichung des Manuskriptes "Exploring the reduction mechanism of $^{99}\text{Tc(VII)}$ in NaClO_4 : A spectro-electrochemical approach" zur Publikation in der OA Zeitschrift "Environmental Science & Technology Engineering".

AP3:

- Weitergabe weiterer Tc Sorptionsdaten (z. B. Grünrost) an den Projektkoordinator GRS.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Rodríguez Hernández, D. M.: Technetium environmental chemistry: Mechanisms for the surface-mediated reduction of Tc(VII); Doktorarbeit an der TU Dresden

Rodríguez, D.M.; Mayordomo, N.; Schild, D.; Shams Aldin Azzam, S.; Brendler, V.; Müller, K.; Stumpf, T.: Reductive immobilization of $^{99}\text{Tc(VII)}$ by FeS_2 : the effect of marcasite. *Chemosphere* 2021, 281, 130904

Mayordomo, N.; Rodríguez, D.M.; Rossberg, A.; Foerstendorf, H.; Heim, K.; Brendler, V.; Müller, K.: Analysis of technetium immobilization and its molecular retention mechanisms by Fe(II)-Al(III)-Cl layered double hydroxide. *Chem. Eng. J.* 2021, 408, 127265

Gero Padberg Uranium carbonates removal by Layered Double Hydroxides; Masterarbeit an der TU Dresden, 2021

Mayordomo, et al.: Technetium immobilization by green rust chloride. Vortrag, Goldschmidt 2021 conference. July 4-7, 2021, online

Mayordomo, N.; et al.: Technetium immobilization by chloride green rust. Vortrag, TransRet2020 Workshop. October 12-13, 2021, online

Zuwendungsempfänger: Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Hermann-von-Helmholtz-Platz 1, 76344 Eggenstein-Leopoldshafen		Förderkennzeichen: 02 E 11607C
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Verhalten langlebiger Spalt- und Aktivierungsprodukte im Nahfeld von Endlagern unterschiedlicher Wirtsgesteine und Möglichkeiten ihrer Rückhaltung (VESPA II), Teilprojekt C		
Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit Bereich C3: Sicherheitsnachweis, Feld: 3.1		
Laufzeit des Vorhabens: 01.09.2017 bis 30.06.2022	Berichtszeitraum: 01.07.2021 bis 31.12.2021	
Gesamtkosten des Vorhabens: 661.628,00 EUR	Projektleiter: 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}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}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) Abschluss des Schreibens und Verteidigung der Dissertation in AP1 (S. Duckworth, Dezember 2021). Für die Arbeiten in der Verlängerungsphase zudem: (ii) Literaturrecherche und thermodynamische Rechnungen zu den Systemen Tc-EDTA, Tc-NTA, Tc-Zitrat, Tc-Oxalat und Tc-Phthalat. (iii) Orientierende Löslichkeitsexperimente (aus Unter- und Übersättigung) in den Systemen Tc-EDTA, Tc-NTA, Tc-Zitrat, Tc-Oxalat und Tc-Phthalat. (iii) Experimentelles Design für umfassende Löslichkeitsexperimente mit Tc bei Anwesenheit von Sulfid.
- AP2: Keine weiteren Arbeiten. Beginn Erstellung des Abschlussberichts zu diesem AP.
- AP3: (i) Abschluss des Schreibens und Verteidigung der Dissertation in AP3 (T. Platte). (ii) Start experimenteller Arbeiten in der Verlängerungsphase zur Tc-Rückhaltung an Fe-Phasen.
- AP4: (i) Abschluss der Datenauswertung. (ii) Zusammenfassende Darstellung der Ergebnisse. (iii) Beginn der Erstellung des Abschlussberichts zu diesem AP.
- AP5: Es wurden von KIT-INE keine Arbeiten im Berichtszeitraum durchgeführt.
- AP6: Es wurde mit der Erstellung des Abschlussberichts begonnen.

4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1: (i) Abschluss der orientierenden Löslichkeitsexperimente (aus Unter- und Übersättigung) in den Systemen Tc-EDTA, Tc-NTA, Tc-Zitrat, Tc-Oxalat und Tc-Phthalat. (ii) XAFS Analysen in den Systemen Tc-EDTA, Tc-NTA, Tc-Zitrat, Tc-Oxalat und Tc-Phthalat. (iii) Systematisch Löslichkeitsexperimente unter Variation verschiedener Einflussparameter im System Tc-EDTA, für welches in den Löslichkeitsexperimenten der größte Effekt gefunden wurde. (iv) Löslichkeitsexperimente mit Tc bei Anwesenheit von Sulfid. (v) Arbeiten am Abschlussbericht.
- AP2: Beginn der Erstellung des Abschlussberichts zu diesem AP.
- AP3: (i) Fortsetzung der experimentellen Arbeiten in der Verlängerungsphase zur Tc-Rückhaltung an Fe-Phasen. (ii) Beginn der Erstellung des Abschlussberichts und Erstellung eines weiteren Manuskripts zur I-Rückhaltung durch Fe-Phasen.
- AP4: Arbeiten zur Erstellen des Abschlussberichts.
- AP5: Es sind von KIT-INE keine Arbeiten im kommenden Berichtszeitraum geplant.
- AP6: Fortlaufende Arbeiten zur Erstellung des Abschlussberichts.

5. Berichte, Veröffentlichungen

T. Platte., Dissertation, "Rückhaltung von Iod durch die Eisen-Sekundärphasen Grünrost und Magnetit", KIT, DOI: 10.5445/IR/1000139224

S. Duckworth, Dissertation, "Aquatische Chemie von Technetium in Anwesenheit anorganischer und organischer Liganden unter endlagerrelevanten Bedingungen", KIT

Zuwendungsempfänger: Forschungszentrum Jülich GmbH, Wilhelm-Johnen-Straße, 52428 Jülich		Förderkennzeichen: 02 E 11607D
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Verhalten langlebiger Spalt- und Aktivierungsprodukte im Nahfeld von Endlagern unterschiedlicher Wirtsgesteine und Möglichkeiten ihrer Rückhaltung (VESPA II), Teilprojekt D		
Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit Bereich C3: Sicherheitsnachweis, Feld: 3.1		
Laufzeit des Vorhabens: 01.09.2017 bis 30.06.2022	Berichtszeitraum: 01.07.2021 bis 31.12.2021	
Gesamtkosten des Vorhabens: 471.605,00 EUR	Projektleiter: Dr. Deissmann	

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}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}I spielt in vielen Analysen zur Langzeitsicherheit von tiefen geologischen Endlagern für hochradioaktive Abfälle eine große Rolle. Im Rahmen des vorgeschlagenen Projekts sollen unterschiedliche Rückhalte-mechanismen von Iodid an LDH quantitativ bewertet werden und Daten für Modellrechnungen ermittelt werden. Zusätzlich werden Daten zum Stoffinventar von ^{129}I in abgebrannten Brennelementen und damit der maximal aus dem Abfall freisetzbaren ^{129}I -Stoffmenge ermittelt.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Das Untersuchungsprogramm gliedert sich in 4 Arbeitspakete (AP):

- AP1: Methodenentwicklung hinsichtlich der Untersuchung der diffusionsinduzierten Fällung von $\text{Ca}(\text{Sr})\text{CO}_3$ -Polymorphen und des ^{226}Ra -Einbaus mittels Mikrofluidik unter kontrollierten Umgebungsbedingungen sowie zur online In-situ-Charakterisierung verschiedener $(\text{Ca},\text{Sr})\text{CO}_3$ -Polymorphe in den Mikroreaktoren mittels Raman-Spektroskopie.
- AP2: Experimentelle Untersuchung des präferentiellen Einbaus von ^{226}Ra in verschiedene CaCO_3 -Polymorphe (Calcit, Aragonit, Vaterit) sowie des Einflusses von Temperatur und Sr-Gehalt in $(\text{Ca},\text{Sr})\text{CO}_3$ auf den ^{226}Ra -Einbau inkl. Optimierung des Versuchsaufbaus unter Verwendung des chemischen Analogons Ba.
- AP3: Ermittlung thermodynamischer Eigenschaften von Ra-haltigen Karbonaten unter Berücksichtigung verschiedener Mechanismen des Ra-Einbaus.
- AP4: Ergebnisdokumentation.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP1: Der Schwerpunkt der im Berichtszeitraum durchgeführten Arbeiten betraf Design und Entwicklung von gasdichten und für Experimente mit Radionukliden geeigneter Mikrofluidikreaktoren zur Untersuchung diffusions-induzierter Fällungsprozesse sowie die Verfahrensentwicklung zur In-situ-Identifizierung und Quantifizierung verschiedener Karbonatspezies mittels Raman-Spektroskopie. Des Weiteren erfolgte eine Kompatibilitätsprüfung und Beschaffung einer Temperaturkontrolleinheit für die Mikrofluidikanlage zur Durchführung von Experimenten bei erhöhten Temperaturen.
- AP2: Im Rahmen des AP2 wurden erste orientierende Mikrofluidik-Experimente zur Untersuchung der Polymorphie von CaCO_3 in den binären Systemen $(\text{Ca},\text{Ba})\text{CO}_3$ und $(\text{Ca},\text{Sr})\text{CO}_3$ in Abhängigkeit von chemischer Zusammensetzung und Temperatur durchgeführt.
- AP3: Mit der Entwicklung einer Methodik zur Ermittlung der Löslichkeitsprodukte der in den Mikrofluidikexperimenten präzipitierten Mischkristallphasen wurde begonnen.

4. Geplante Weiterarbeiten

Der Schwerpunkt der für das nächste Halbjahr geplanten Arbeiten liegt auf den im AP2 geplanten Arbeiten. Hierbei soll mit den in AP1 entwickelten Mikroreaktoren und Verfahren untersucht werden, welches CaCO_3 -Polymorph (Calcit, Aragonit, Vaterit) den Einbau von ^{226}Ra begünstigt und ob eine Korrelation zwischen der Aufnahme von ^{226}Ra und dem anfänglichen Sr-Gehalt im $(\text{Ca},\text{Sr})\text{CO}_3$ -Gitter besteht, wobei auch die Temperaturabhängigkeit des Ra-Einbaus analysiert werden soll. Dabei ist zunächst eine Optimierung des Versuchsaufbaus (u. a. im Hinblick auf eine bevorzugte Bildung eines Polymorphs und der Injektionsraten) unter Verwendung des sich chemisch ähnlich wie Ra verhaltenden Ba vorgesehen. Vor der Injektion von Ba bzw. Ra werden die kopräzipitierten $(\text{Ca},\text{Sr})\text{CO}_3$ -Polymorphe zunächst mit den in AP1 entwickelten Methoden charakterisiert, um die Anteile der verschiedenen Phasen zu bestimmen und die experimentellen Randbedingungen im Hinblick auf die gezielte Fällung bestimmter Phasen weiter zu optimieren. Nach Abschluss dieser Optimierungsphase sind dann weiterführende Experimente unter Verwendung von ^{226}Ra geplant. Des Weiteren werden die Arbeiten im AP3 zur Ermittlung thermodynamischer Daten der ausgefallten Karbonatmischkristallphasen fortgeführt, um die langfristige Stabilität der Phasen und möglicher Umwandlungsprozesse in Abhängigkeit von den Umgebungsbedingungen einschätzen zu können.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Auftragnehmer: BGE Technology GmbH, Eschenstr. 55, 31224 Peine		Förderkennzeichen: 02 E 11617A
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Entwicklung eines Sicherheits- und Nachweiskonzeptes für ein Endlager für Wärme entwickelnde radioaktive Abfälle im Kristallingestein in Deutschland (CHRISTA II), Teilprojekt A		
Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte, Feld: 2.1		
Laufzeit des Vorhabens: 01.09.2017 bis 30.11.2021	Berichtszeitraum: 01.07.2021 bis 30.11.2021	
Gesamtkosten des Vorhabens: 865.583,78 EUR	Projektleiter: 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

Die Arbeiten im Berichtszeitraum beinhalteten in erster Linie die Dokumentation der erzielten Ergebnisse. Zusammenfassend lässt sich folgendes sagen:

In diesem Vorhaben wurde unter Berücksichtigung der Endlagersicherheitsanforderungsverordnung (EndlSiAnfV 2020) ein Entwurf für das methodische Vorgehen zur sicherheitlichen Bewertung von Endlagersystemen in Kristallingesteinen in Deutschland erarbeitet. Es wurden drei mögliche Optionen zur Einlagerung definiert. Es handelt sich um die Einlagerung in mehreren „multiplen ewG“ (ewG = einschlusswirksamer Gebirgsbereich), das „modifizierte KBS-3-Konzept“ (basierend auf dem skandinavischen Behälter-Konzept) und dem „überlagernden ewG“ (basierend auf überlagernden Ton- oder Salzschieben).

Die Systemanalyse basiert auf der umfassenden Beschreibung der Endlagersysteme durch FEP-Kataloge, die alle Komponenten und Prozesse des Endlagersystems abbilden. Solche FEP-Kataloge wurden für alle drei Einlagerungsoptionen erarbeitet. Speziell für die Option „multipler ewG“ wurde ein neu entwickeltes Modellierungskonzept vorgeschlagen und erprobt, das auf einer Kombination von Kluftnetzwerk-Modellen und Kontinuumsmodellen basiert. Zur Bewertung des sicheren Einschlusses wurden Indikatoren spezifiziert und auf die drei Einlagerungsoptionen exemplarisch angewandt. Abschließend wurden offene Fragen identifiziert, die für eine zukünftige Sicherheitsbewertung für ein Endlager in einem Kristallingestein geklärt werden müssen.

4. Geplante Weiterarbeiten

Keine. Projekt endet zum 30.11.2021.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Jobmann, M., Burlaka, V., Flüge, J., Frank, T., Frenzel, B., Hassanzadegan, A., Johnen, M., Krumbholz, M., Leon Vargas, R. P., Lommerzheim, A., Maßmann, J., Mayer, K.-M., Guevara Morel, C., Mrugalla, S., Müller, C., Noseck, U., Rübel, A., Simo, E., Sönke, J., Stark, L., Thiedau, J., Weitkamp, A., Weihmann, S. & Wolf, J. (2021): Methodisches Vorgehen zur sicherheitlichen Bewertung von Endlagersystemen im Kristallingestein in Deutschland, Forschungsprojekt CHRISTA-II, Synthesebericht BGETEC 2021-17, BGR, GRS, BGE TECHNOLOGY GmbH, Hannover, Braunschweig, Peine

Leon Vargas, R. P., Jobmann, M., Seidel, D. & Wunderlich, A. (2021): Analysen zur Integrität technischer und geotechnischer Barrieren für Endlager in Kristallinstandorten in Deutschland, Forschungsprojekt CHRITA-II, Technischer Bericht BGETEC 2021-21, BGE TECHNOLOGY GmbH, Peine.

Jobmann, M. & Burlaka, V. (2021): Verfüll- und Verschlusskonzepte für Endlager im Kristallingestein in Deutschland, Technischer Bericht, BGETEC 2019-05, BGE TECHNOLOGY, Peine

Jobmann, M., Beushausen, M., Burlaka, V., Flüge, J., Frenzel, B., Lommerzheim, A., Maßmann, J., Müller, C., Noseck, U., Rübel, A., Sönke, J., Thiedau, J., Weitkamp, A. & Wolf, J. (2021): Strategie und konzeptionelles Vorgehen zur Sicherheitsbewertung, Forschungsprojekt CHRISTA-II, Technischer Bericht BGETEC 2021-11, BGR; GRS, BGE TECHNOLOGY GmbH, Braunschweig, Hannover, Peine

Jobmann, M., Maßmann, J., Meleshyn, A., Müller, C. & Thiedau, J. (2021): Quantifizierung von Integritätskriterien für Sicherheitsnachweise an Kristallinstandorten in Deutschland, Technischer Bericht, BGETEC 2019-04, BGR, GRS, BGE TECHNOLOGY GmbH, Hannover, Braunschweig, Peine

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 11617B
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Entwicklung eines Sicherheits- und Nachweiskonzeptes für ein Endlager für Wärme entwickelnde radioaktive Abfälle im Kristallingestein in Deutschland (CHRISTA II), Teilprojekt B		
Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte, Feld: 2.1		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2017 bis 30.11.2021	Berichtszeitraum: 01.07.2021 bis 30.11.2021	
Gesamtkosten des Vorhabens: 870.640,00 EUR	Projektleiter: 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 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

- AP3: Dokumentation der Abhängigkeitskonfiguration der FEP im FEP-Katalog für das modifizierte KBS3-Konzept.
- AP4: Ableitung von Maßstäben zur Bewertung, wann eine erhebliche Beeinträchtigung der Barrierewirkung durch Änderung chemischer Verhältnisse zu erwarten ist. Erarbeitung eines entsprechenden Nachweiskonzeptes.
- AP6: Dokumentation der Ergebnisse aus dem Vorhaben CHRISTA-II für den Synthesebericht.

4. Geplante Weiterarbeiten

Das Vorhaben wurde am 30.11.2021 beendet.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Jobmann et al. (2021): Methodisches Vorgehen zur sicherheitlichen Bewertung von Endlagersystemen im Kristallin in Deutschland (Synthesebericht). BGE Technology, BGE TEC 2021-17, in Bearbeitung

Wolf, J., Becker, D.-A., Flügge, J., Frank, T., Johnen, M. (2021): Bewertung des sicheren Einschlusses von Radionukliden in Endlagersystemen im Kristallingestein. Ergebnisse aus dem Vorhaben CHRISTA-II, GRS-658, Gesellschaft für Anlagen und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Braunschweig, in Bearbeitung

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 11627	
Vorhabensbezeichnung: Arteigene Versatz- und Verschlussmaterialien für die Endlagerung hochradioaktiver Abfälle in Tonformationen (AVET)			
Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte, Feld: 2.3			
Laufzeit des Vorhabens: 01.11.2017 bis 31.10.2022		Berichtszeitraum: 01.07.2021 bis 31.12.2021	
Gesamtkosten des Vorhabens: 1.813.589,00 EUR		Projektleiter: 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 Ausbruchsmaterial aus dem Opalinuston (ist dem in einem deutschen Endlager zu erwartenden Wirtsgestein am ähnlichsten - Standortmodell SÜD) und des Gemisches 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 der Auffahrung einer neuen Strecke in der sandigen Fazies des Opalinustons im Untertagelabor Mont-Terri und am Gemisch mit Bentonitzusatz in drei Arbeitspaketen durchgeführt:

- AP1: Ermittlung der geotechnischen Eigenschaften wie z. B. Kompaktion und Permeabilität des Ausbruchmaterials zur langfristigen Abdichtung der Endlager Hohlräume
- AP2: Ermittlung der geotechnischen Eigenschaften des kompaktierten Gemisches aus dem Ausbruchtonstein mit Bentonitzusatz zur Prüfung der Eignung für den Verschluss der Strecken und Schächte
- 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
- AP4: Untersuchung des Gastransportes in geschädigtem Tonstein zur Beteiligung am EU-Projekt EURAD im WP6-GAS

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Zur Untersuchung von Temperatureinflüssen wurden langzeitige Versuche an zwei Bentonit-Proben mit einer Einbaudichte von 1.4 g/cm^3 und zwei Tonstein-Bentonit-Proben (7/3) mit einer Einbaudichte von 1.6 g/cm^3 gestartet. Die Proben wurden in Oedometerzellen eingebaut. Die Versuche werden bei unterschiedlichen Temperaturen im Bereich von 23-90 °C in folgenden Schritten durchgeführt, zur Bestimmung von:

- Quellung der Proben unter einer niedrigen Axialspannung von 0.2 MPa und bei konstanter Temperatur von 23 °C bzw. 90 °C;
- Kompaktion der Proben mit steigender Axialspannung bis zu 4 MPa bei konstanter Temperatur von 23 °C bzw. 90 °C;
- Änderungen der Porosität und Wasserpermeabilität mit Temperaturerhöhung/-absenkung;
- Änderungen der Gasströmung in den wasser-gesättigten und kompaktierten Proben mit Temperaturerhöhung/-absenkung.

Die Schritte 1-2 sind erfolgreich beendet und folgen den weiteren Schritten 3-4 weiter.

Im EU-Projekt EURAD-P6-GAS wurden Laboruntersuchungen zur Ermittlung des Gasflussverhaltens von geschädigtem Tonstein geplant und durchgeführt. Die erste Versuchsreihe mit drei geschädigten Proben aus Opalinuston und Callovo-Oxfordian-Tonstein ist abgeschlossen. Die zweite Versuchsreihe mit drei Opalinustonproben ist im Lauf. Dabei wird das Verheilungsverhalten der geschädigten Tonproben unter Bedingungen von Wasserinjektion und Belastungserhöhung ermittelt. Danach werden Gasdurchbruchdrücke und -permeabilitäten der wasser-gesättigten Proben bestimmt. Auswirkungen der Gasströmung auf die Barrierefunktion der Auflockerungszone werden durch Vergleich der Wasserpermeabilität vor und nach der Gasströmung beurteilt.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Weiterführung der Versuche zu Temperatureinflüsse auf die Eigenschaften des Bentonits und Tonstein-Bentonit-Gemischs
- Weiterführung der Gasströmungsteste mit den verheilten Tonsteinproben

5. Berichte, Veröffentlichungen

Zhang CL (2021): Deformation and water/gas flow properties of claystone/bentonite mixtures. *Journal of Rock Mechanics and Geotechnical Engineering* 13 (2021) 864-874. <https://doi.org/10.1016/j.jrmge.2020.12.003>

Zuwendungsempfänger: Technische Universität Darmstadt, Karolinenplatz 5, 64289 Darmstadt		Förderkennzeichen: 02 E 11637A
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Geomechanisch-numerische Modellierungen zur Charakterisierung des tektonischen Spannungszustandes für die Entsorgung radioaktiver Abfälle in Deutschland (SpannEnD), Teilprojekt A: 3D-Spannungsmodell und Aufskalierung		
Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit Bereich C1: Standortauswahl, Feld: 1.2		
Laufzeit des Vorhabens: 01.01.2018 bis 31.12.2021	Berichtszeitraum: 01.07.2021 bis 31.12.2021	
Gesamtkosten des Vorhabens: 241.009,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Henk	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das tektonische Spannungsfeld in der Erdkruste wirkt sich auf eine Vielzahl der Kriterien zur Standortauswahl für die Entsorgung radioaktiver Abfälle aus. Eine verlässliche Prognose im Vorfeld von Erkundungsmaßnahmen wird allerdings dadurch erschwert, dass das Spannungsfeld in seiner Orientierung und Magnitude nicht einheitlich ist. Vielmehr können in Abhängigkeit vom Untergroundaufbau (Lithologien, Störungen) lokal deutliche Abweichungen von der überregional bekannten Spannungsverteilung auftreten. Um ein prozessbasiertes Verständnis dieser räumlichen Variabilität zu erreichen, wird ein geomechanisch-numerisches 3D-Spannungsmodell für Deutschland (Dimensionen ca. 1200 x 900 x 80 km³) erstellt. Dieses Modell wird an punktuell gemessenen Spannungsdaten kalibriert und ermöglicht auf Basis kontinuumsmechanischer Ansätze Prognosen für Bereiche ohne Spannungsdaten und die Ableitung aller sechs Komponenten des Spannungstensors. Darüber hinaus werden Modellierungswerkzeuge für räumliche Skalen übergreifende Modelle entwickelt. So wird ein konsistenter Spannungsübertrag zwischen dem Deutschland-Modell und ca. drei Größenordnungen kleineren Teilmodellen ermöglicht. Alle Arbeiten liefern die erforderlichen Grundlagen und Modellierungswerkzeuge für zukünftige geomechanische Standortmodelle.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Das Verbundprojekt gliedert sich in zwei Arbeitspakete (APs):

In AP1 (Teilprojekt A) wird ein großräumiges geomechanisch-numerisches 3D-Spannungsmodell für Deutschland entwickelt, das an allen aktuell verfügbaren Spannungsdaten kalibriert wird.

In AP2 (Teilprojekt B) werden Modellierungstechniken zur Wahl geeigneter, skalenabhängiger Gesteins- bzw. Gebirgsparameter sowie Konzepte für die für ein entsprechendes Modellvolumen erforderlichen repräsentativen Kalibrierungsdaten untersucht.

Weitere Arbeitsziele sind die Weiterentwicklung der Modellierungswerkzeuge, welche die Grundlagen für eine zukünftige Standortcharakterisierung liefern und einen zukünftigen Standortvergleich bezüglich des Spannungsfeldes nach einheitlichen Kriterien ermöglicht und die Erstellung einer Datenbank zu Spannungsmagnituden.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im zweiten Halbjahr 2021 lag der Fokus auf der Erstellung und Auswertung des finalen geomechanisch-numerischen Modells von Deutschland sowie der Aufbereitung der Ergebnisse und deren Publikation. Das im ersten Halbjahr 2021 erstellte Modell wurde für die finale Version noch einmal verfeinert. Insgesamt umfasst das finale Modell 11,1 Millionen Hexaeder-Elemente, was einer Verdreifachung der Elementanzahl entspricht. Diese erhöhte Auflösung resultiert in einer lateralen Auflösung von $2,5 \times 2,5 \text{ km}^2$ und einer vertikalen Auflösung in den obersten 10 km von etwa 240 m für ein Element. Die generelle Modellgeometrie, die stratigraphische Auflösung und die verwendeten Materialparameter wurden nicht verändert. Die höhere Elementauflösung spiegelt sich in räumlich kontrastreicheren Ergebnissen wieder, ohne dass sich die Ergebnisse deutlich unterscheiden. Die Anpassung der Modellresultate der minimalen und maximalen horizontalen Spannungsmagnituden (S_{Hmin} und S_{Hmax}) und der Orientierung von S_{Hmax} sind unverändert gut im Vergleich zu den verfügbaren Messdaten.

Für das finale Modell wurden einige zusätzliche Auswertungen bzw. Vergleiche vorgenommen. Um die Prognosequalität der modellierten S_{Hmax} Orientierungen besser einschätzen zu können, wurden diese mit gemittelten Werten aus der World Stress Map Datenbank verglichen. Nahezu alle Modellregionen haben Abweichungen, die unterhalb der Standardabweichung liegen. Für die Beurteilung der modellierten Spannungsmagnituden wurden die Ergebnisse des Modells vor allem mit Daten aus dem Norddeutschen Becken, dem Oberrheingraben und dem Molasse Becken verglichen. Dabei wurden, neben einigen schon für die Kalibrierung verwendeten Daten, zahlreiche zusätzliche Messwerte verwendet. Der Vergleich erfolgte dabei separat für jede einzelne Messlokalität, indem die Magnituden der vertikalen, minimalen und maximalen horizontalen Spannung (S_v , S_{Hmin} und S_{Hmax}) an den entsprechenden Bohrlokalitäten aus dem Modell ausgelesen und verglichen wurden. Die resultierenden Ergebnisse und die Auswertungen der Modellergebnisse wurden aufbereitet und im Dezember 2021 beim Journal Geothermal Energy eingereicht (Ahlers et al., 2021c). Aktuell läuft der Review Prozess. Das finale Modell inklusive der dazugehörigen vollständigen Modellergebnisse wurden zusätzlich als Datensatz veröffentlicht (Ahlers et al., 2021a). Ferner wurde das SpannEnD-Projekt im Rahmen der SafeND Tagung in Berlin vorgestellt (Ahlers et al., 2021b; Reiter et al., 2021).

4. Geplante Weiterarbeiten

Da die Projektlaufzeit zum 31.12.21 endet, erfolgt noch die Erstellung des Abschlussberichtes.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Publikationen:

Ahlers, S., Henk, A., Hergert, T., Reiter, K., Müller, B., Röckel, L., Heidbach, O., Morawietz, S., Scheck-Wenderoth, M., and Anikiev, D. (2021a): The crustal stress state of Germany – Results of a 3D geomechanical model v2.0. <https://tudatalib.ulb.tu-darmstadt.de/handle/tudatalib/2624.5>

Ahlers, S., Henk, A., Hergert, T., Reiter, K., Müller, B., Röckel, L., Heidbach, O., Morawietz, S., Scheck-Wenderoth, M., and Anikiev, D. (2021b): The recent stress state of Germany – results of a geomechanical–numerical 3D model, SafeND, 9-12. Dezember 2021, Berlin, Germany

Reiter, K., Ahlers, S., Morawietz, S., Röckel, L., Hergert, T., Henk, A., Müller, B., and Heidbach, O. (2021): The SpannEnD project: 3-D stress prediction in the upper crust of Germany, SafeND, 9-12. Dezember 2021, Berlin, Germany

Preprint/in Review:

Ahlers, S., Röckel, L., Hergert, T., Reiter, K., Heidbach, O., Henk, A., Müller, B., Morawietz, S., Scheck-Wenderoth, M., and Anikiev, D. (2021c): The Crustal Stress Field of Germany - A Refined Prediction, Geothermal Energy. [preprint], <https://doi.org/10.21203/rs.3.rs-1128920/v1>, in review, 2021

Zuwendungsempfänger: Helmholtz-Zentrum Potsdam Deutsches GeoForschungsZentrum GFZ, Telegrafenberg, 14473 Potsdam		Förderkennzeichen: 02 E 11637B
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Geomechanisch-numerische Modellierungen zur Charakterisierung des tektonischen Spannungszustandes für die Entsorgung radioaktiver Abfälle in Deutschland (SpannEnD), Teilprojekt B: Multiskalenansatz		
Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit Bereich C1: Standortauswahl, Feld: 1.2		
Laufzeit des Vorhabens: 01.01.2018 bis 31.12.2021	Berichtszeitraum: 01.07.2021 bis 31.12.2021	
Gesamtkosten des Vorhabens: 228.586,00 EUR	Projektleiter: Dr. Heidbach	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das tektonische Spannungsfeld in der Erdkruste wirkt sich auf eine Vielzahl der Kriterien zur Standortauswahl für die Entsorgung radioaktiver Abfälle aus. Eine verlässliche Prognose im Vorfeld von Erkundungsmaßnahmen wird allerdings dadurch erschwert, dass das Spannungsfeld in seiner Orientierung und Magnitude nicht einheitlich ist. Vielmehr können in Abhängigkeit vom Untergrundaufbau (Lithologien, Störungen) lokal deutliche Abweichungen von der überregional bekannten Spannungsverteilung auftreten. Um ein prozessbasiertes Verständnis dieser räumlichen Variabilität zu erreichen, wird ein geomechanisch-numerisches 3D-Spannungsmodell für Deutschland (Dimensionen ca. 1200 x 900 x 80 km³) erstellt. Dieses Modell wird an punktuell gemessenen Spannungsdaten kalibriert und ermöglicht auf Basis kontinuumsmechanischer Ansätze Prognosen für Bereiche ohne Spannungsdaten und die Ableitung aller sechs Komponenten des Spannungstensors. Darüber hinaus werden Modellierungswerkzeuge für räumliche Skalen übergreifende Modelle entwickelt. So wird ein konsistenter Spannungsübertrag zwischen dem Deutschland-Modell und ca. drei Größenordnungen kleineren Teilmodellen ermöglicht. Alle Arbeiten liefern die erforderlichen Grundlagen und Modellierungswerkzeuge für zukünftige geomechanische Standortmodelle.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Das Verbundprojekt gliedert sich in zwei Arbeitspakete (APs):

In AP1 (Teilprojekt A) wird ein großräumiges geomechanisch-numerischen 3D-Spannungsmodells für Deutschland entwickelt, das an allen aktuell verfügbaren, tatsächlich gemessenen Spannungswerten kalibriert wird.

In AP2 (Teilprojekt B) werden Modellierungstechniken zur Wahl geeigneter, skalenabhängiger Gesteins- bzw. Gebirgsparameter sowie Konzepte für die für ein entsprechendes Modellvolumen erforderlichen repräsentativen Kalibrierungsdaten untersucht.

Weitere Arbeitsziele sind die Weiterentwicklung der Modellierungswerkzeuge, welche die Grundlagen für eine zukünftige Standortcharakterisierung liefern und einen zukünftigen Standortvergleich bezüglich des Spannungsfeldes nach einheitlichen Kriterien ermöglicht und die Erstellung einer Datenbank zu Spannungsmagnituden.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Auf der Grundlage des neuen Geologiedatengesetzes haben wir nun den Zugang zu weiteren Spannungsmagnitudendatensätzen in Deutschland erhalten. Wir haben diese zum Teil qualitativ hochwertigen Datensätze aus Hydro-Frac Tests Ende vergangenen Jahres gesichtet und begonnen diese zu analysieren, um sie in eine aktualisierte Version der Spannungsmagnitudendatenbank für Deutschland und Umgebung von Morawietz et al. (2020), die im Rahmen dieses Projektes erstellt worden ist, aufzunehmen. Ebenso konnten wir die Überführung dieser Spannungsmagnitudendatenbank in die vollkommen neu programmierte Datenbankstruktur des World Stress Map (WSM) Projektes basierend auf PostgreSQL mit einer Beta-Version abgeschlossen werden. Diese umfasst auch die automatisierte Zuordnung von Datenqualitäten unter Nutzung der ebenfalls im Rahmen dieses Projektes erstmals für Spannungsmagnitudendaten aufgestellten Qualitätskriterien. Die Tests der neuen Datenbank wurde Ende vergangenen Jahres begonnen und kleinere Fehler werden derzeit behoben, um die Veröffentlichung und Freischaltung des Zugangs via Webbrowser-Interface in 2022 umsetzen zu können.

Weiterhin wurden die Ergebnisse der generischen geomechanisch-numerischen 3D-Modelle mit dem der Multi-Skalenansatz quantitativ getestet, erfolgreich mit weiteren Parameterstudien ergänzt, und ein erstes Konzept für eine Publikation der Ergebnisse erstellt. Dabei haben wir festgestellt, dass wir zwar zeigen können, dass der Ansatz der Verwendung synthetischer Spannungsmagnitudendaten aus regionalen Modellen zur Modellkalibrierung von lokalen Modellen innerhalb des regionalen Modellvolumens robust ist, aber dass wir an einem realen Beispiel die Anwendung zeigen müssen, um in der Publikation für die Anwender zu zeigen, worin der Vorteil und Grenzen des Ansatzes liegen. Als Beispiel haben wir die Bayerische Molasse gewählt, da wir hier auf ein regionales Modell von Ziegler et al. (2016) zurückgreifen können, so dass der Aufwand überschaubar bleibt. Es erfolgte eine Aktualisierung bezüglich der Kalibrierung des regionalen Modells, da in der Zwischenzeit mehr und bessere Daten für die Modellkalibrierung in dieser Region vorliegen. Die Arbeiten an dem Manuskript konnten daher nicht abgeschlossen werden.

Die Ergebnisse aus dem Projekt wurden auf der Veranstaltung SafeND des BASE vom 10.-12. November 2021 in vier Beiträgen (Vorträge und Poster) vorgestellt. Hierzu gehörten unter anderem auch die Spannungsmagnitudendatenbank (Sophia Morawietz) und der Multi-Skalen Modellansatz (Moritz Ziegler).

4. Geplante Weiterarbeiten

Das Projekt ist zwar formal abgeschlossen, aber folgende Arbeiten gehen weiter, um diese vor Erstellung des Endberichtes im Juni dieses Jahres beenden zu können:

- Einreichen der Publikation zu den Ergebnissen der generischen geomechanisch-numerischen Modelle zum „multi-scale“ Ansatz in einem peer-reviewed open access internationalen Journal (voraussichtlich Solid Earth).
- Anfertigen des Abschlussberichtes zum Projekt SpannEnD.
- Erweiterung der Spannungsmagnitudendatenbank Deutschland und Umgebung mit ca. 400 neuen Datensätzen (die erste Version enthielt 564 Datensätze).
- Einbindung der Daten in die Beta-Version der neuen webbasierten WSM Datenbank basierende auf PostgreSQL.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Kaiserstr. 12, 76131 Karlsruhe		Förderkennzeichen: 02 E 11637C
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Geomechanisch-numerische Modellierungen zur Charakterisierung des tektonischen Spannungszustandes für die Entsorgung radioaktiver Abfälle in Deutschland (SpannEnD), Teilprojekt C: Geomechanik von Sedimentbecken		
Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit Bereich C1: Standortauswahl, Feld: 1.2		
Laufzeit des Vorhabens: 01.01.2018 bis 31.12.2021	Berichtszeitraum: 01.07.2021 bis 31.12.2021	
Gesamtkosten des Vorhabens: 175.974,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Schilling	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das tektonische Spannungsfeld in der Erdkruste wirkt sich auf eine Vielzahl der Kriterien zur Standortauswahl für die Entsorgung radioaktiver Abfälle aus. Eine verlässliche Prognose im Vorfeld von Erkundungsmaßnahmen wird allerdings dadurch erschwert, dass das Spannungsfeld in seiner Orientierung und Magnitude nicht einheitlich ist. Vielmehr können in Abhängigkeit vom Untergroundaufbau (Lithologien, Störungen) lokal deutliche Abweichungen von der überregional bekannten Spannungsverteilung auftreten. Um ein prozessbasiertes Verständnis dieser räumlichen Variabilität zu erreichen, wird ein geomechanisch-numerisches 3D-Spannungsmodell für Deutschland (Dimensionen ca. 1200 x 900 x 80 km³) erstellt. Dieses Modell wird an punktuell gemessenen Spannungsdaten kalibriert und ermöglicht auf Basis kontinuumsmechanischer Ansätze Prognosen für Bereiche ohne Spannungsdaten und die Ableitung aller sechs Komponenten des Spannungstensors. Darüber hinaus werden Modellierungswerkzeuge für räumliche Skalen übergreifende Modelle entwickelt. So wird ein konsistenter Spannungsübertrag zwischen dem Deutschland-Modell und ca. drei Größenordnungen kleineren Teilmodellen ermöglicht. Alle Arbeiten liefern die erforderlichen Grundlagen und Modellierungswerkzeuge für zukünftige geomechanische Standortmodelle.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Das Verbundprojekt gliedert sich in zwei Arbeitspakete (APs):

In AP1 (Teilprojekt A) wird ein großräumiges geomechanisch-numerisches 3D-Spannungsmodell für Deutschland entwickelt, das an allen aktuell verfügbaren Spannungsdaten kalibriert wird.

In AP2 (Teilprojekt B) werden Modellierungstechniken zur Wahl geeigneter, skalenabhängiger Gesteins- bzw. Gebirgsparameter sowie Konzepte für die für ein entsprechendes Modellvolumen erforderlichen repräsentativen Kalibrierungsdaten untersucht.

Weitere Arbeitsziele sind die Weiterentwicklung der Modellierungswerkzeuge, welche die Grundlagen für eine zukünftige Standortcharakterisierung liefern und einen zukünftigen Standortvergleich bezüglich des Spannungsfeldes nach einheitlichen Kriterien ermöglicht und die Erstellung einer Datenbank zu Spannungsmagnituden.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

In vorangegangenen Arbeitsschritten wurden drei Störungssets erstellt:

- Vertikale Geometrie,
- 30 °, 60 ° und 90 ° Einfallen für Aufschiebungen, Abschiebungen und Strike Slip Störungen und
- Semi-realistische Geometrien abgeleitet aus seismischen Sektionen und geologischen Schnitten. Die slip tendency für diese Störungssets wurde unter Annahme verschiedener Rahmenbedingungen basierend auf den Ergebnissen des numerischen Modells von Ahlers (2021) berechnet.

Insgesamt zeigte sich für alle drei Störungssets, dass die slip tendency zunächst generell sehr gering ist, aber für NNO und NW streichende Störungen im Allgemeinen erhöht ist.

Ein Schwerpunkt der Auswertung der slip tendency Ergebnisse lag auf dem Einfluss der Störungsgeometrien bzw. -typen auf die resultierende slip tendency. Hierbei zeigte sich (Ergebnis 1) ein deutlicher Einfluss der Störungsgeometrie auf die ermittelte slip tendency in Abhängigkeit von der Tiefe. Da im Störungsset 2 die Störungsgeometrie in Abhängigkeit des Störungstypen gewählt wurde, können für dieses Störungsset die Aussagen über den Einfluss der Störungsgeometrie auf den Störungstypen übertragen werden. Dabei zeigte sich, (Ergebnis 2) dass, unabhängig vom Streichen der Störungen, die slip tendency für Abschiebungen insgesamt die höchsten Werte annimmt. Mit zunehmender Tiefe nehmen die Werte zwar initial stark ab, pendeln sich ab einer Tiefe von ca. 5000 m bei konstanten Werten ein. Für Überschiebungen liegen die Werte insgesamt deutlich niedriger. Auch für diesen Störungstypen nehmen die slip tendency Werte mit zunehmender Tiefe zunächst stark ab. Jedoch nehmen sie hier ab einer Tiefe von ca. 4000 m wieder leicht zu. Die Strike Slip Störungen zeigen zwar in den obersten 5000 m im Mittel die höchsten slip tendency Werte, diese nehmen jedoch mit zunehmender Tiefe sehr schnell ab, so dass sie ab einer Tiefe von ca. 10000 m deutlich unter den Werten der Abschiebungen und Überschiebungen liegen. Insgesamt steht die Abnahme der slip tendency mit der Tiefe eher im Widerspruch zum Auftreten von Erdbeben, die bevorzugt für größere Tiefen einen Spannungsfeldabbau vorhersagen.

Daher wurde ein weiterer Aspekt in der Auswertung beleuchtet, nämlich der Einfluss des Porendrucks auf die slip tendency. Die Berücksichtigung eines hydrostatischen Porendrucks führt für alle drei untersuchten Störungssets zu einer deutlichen Erhöhung der slip tendency (Ergebnis 3). Dies ist besonders in Bereichen, in denen niedrige slip tendencies vorliegen, der Fall. Hier kommt es zu einer Erhöhung von bis zu 50 % (entspricht einer absoluten Erhöhung von ca. 0.2). Für die Alpine Thrust wurden zudem Szenarien betrachtet, in denen ein überhöhter Porendruck vorliegt, wie sie für Teile des Molassebeckens beobachtet werden. Für einen Porendruckgradienten von 16 MPa/km tritt auf weiten Teilen der Störung eine deutliche Erhöhung der slip tendency um ca. 70 – 90 % auf. Begleitend zu den Auswertungsarbeiten wurden Konferenzbeiträge als Präsentation und Poster vorbereitet und vorgestellt. Ein Paper zu den Ergebnissen der slip tendency Analyse ist in Vorbereitung und soll zeitnah fertig gestellt werden.

4. Geplante Weiterarbeiten

Fertigstellung des Papers zur slip tendency.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Teilnahme an der GeoKarlsruhe 2021 in Karlsruhe; Vortrag: Slip tendency analysis for 60 3D faults in Germany and adjacent areas

Teilnahme am SafeND Symposium 2021 der BASE in Berlin; Poster: Slip tendency analysis of major faults in Germany

Zuarbeit zum Artikel „Standortsuche im Spannungsfeld“ für das GFZ Journal "System Erde"

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 11658A	
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Aktualisierung der Sicherheits- und Nachweismethodik für die HAW-Endlagerung im Tongestein in Deutschland (ANSICHT II), Teilprojekt A			
Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit Bereich C3: Sicherheitsnachweis, Feld: 3.2			
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2018 bis 30.04.2022		Berichtszeitraum: 01.07.2021 bis 31.12.2021	
Gesamtkosten des Vorhabens: 568.700,00 EUR		Projektleiter: Dr. Rübel	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Um die im Rahmen von ANSICHT-I entwickelte Nachweismethodik zu prüfen, sollen im Rahmen von ANSICHT-II noch ausstehende Einzelnachweise demonstrativ dargestellt und damit die Nachweisführung illustriert werden. Offene Fragen im Nachweissystem, die zur einwandfreien Nachweisführung geklärt werden müssen, sollen identifiziert und klar dargestellt werden. Ziel ist es, durch die Gesamtschau der Einzelnachweise, die in ANSICHT-I entwickelte Nachweismethodik zu evaluieren, ggf. Schwachstellen aufzuzeigen und Verbesserungsansätze zu liefern. Darüber hinaus wird diese Betrachtung aufzeigen, welche Daten, im Rahmen einer Standorterkundung, zielgerichtet erhoben werden müssen, damit die Nachweise Integrität der geologischen Barriere, Integrität der geotechnischen Barrieren und Radiologischer Nachweis, in geeigneter Weise geführt werden können.

Die Bearbeitung wird gemeinsam durch BGR, GRS und BGE TECHNOLOGY durchgeführt.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Darstellung und Evaluierung des Integritätsnachweises für die geologische Barriere
- AP2: Darstellung und Evaluierung der Integritätsnachweise für das geotechnische Barriersystem
- AP3: Darstellung des radiologischen Nachweises
- AP4: Berichtswesen

GRS ist federführend für das Arbeitspaket 3. Dieses gliedert sich in die Unteraufgaben:

- AP3.1: 3D-Radionuklid-Transportrechnungen mit d^{3f++}
- AP3.2: Integrierte 1D-Radionuklid-Transportrechnungen mit CLAYPOS
- AP3.3: Integrierte Radionuklid-Transportrechnungen mit REPOTREND
- AP3.4: Rechnungen zum Radionuklidtransport in der Gasphase mit TOUGH2
- AP3.5: Bewertung

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP1: Fortführung der Diskussion mit BGETEC und BGR über das in §5 der Endlagersicherheitsanforderungsverordnung definierte Kriterium zu den Änderungen der chemischen Verhältnisse im Einlagerungsbereich. Entwurf von ersten Vorschlägen für Alternativen bei der Vorgehensweise bei der Durchführung
- AP3.1: Die vom Unterauftragnehmer TECHSIM durchgeführten Entwicklungen am Code, insbesondere die Schnittstelle zur Übernahme der Radionuklidströme aus RepoTREND in d³f++ wurden weiter getestet. Es wurden Modellrechnungen zur Grundwasserbewegung und dem Radionuklidtransport durchgeführt.
- AP3.2: Die Arbeiten sind abgeschlossen.
- AP3.3: Die Arbeiten sind abgeschlossen.
- AP3.4: Es wurden Modifikation des Gastransportmodells in TOUGH2 durchgeführt und mit diesem Modell Rechnungen zur Untersuchung des Einflusses von Inhomogenitäten im Wirtsgestein auf den Gas- und Radionuklidtransport vorgenommen.
Sollten höher permeable Inhomogenitäten im Wirtsgestein, wie z. B. Sandeinschaltungen, das Grubengebäude schneiden, dann können diese zu einer schnelleren Aufsättigung des Grubengebäudes führen. Für diesen Fall ist zu überlegen, ob der Bereich, in dem die Inhomogenität das Grubengebäude schneidet, ein Verschlussystem errichtet wird, um eine hydraulische Trennung zwischen Inhomogenität und Grubengebäude zu erreichen und einen Zufluss von Lösung zu verhindern.

4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1: Fortführung der Diskussion und des Reviews über das in §5 der Endlagersicherheitsanforderungsverordnung definierte Kriterium zu den Änderungen der chemischen Verhältnisse im Einlagerungsbereich.
- AP3.1: Abschluss und Dokumentation der Modellrechnungen mit d³f++ zur Modellierung der Grundwasserbewegung und des Radionuklidtransports.
- AP3.2: Es sind keine weiteren Arbeiten geplant.
- AP3.3: Es sind keine weiteren Arbeiten geplant.
- AP3.4: Es sind keine weiteren Arbeiten geplant.
- AP3.5: Dokumentation der durchgeführten Arbeiten für den Abschlussbericht.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Auftragnehmer: BGE Technology GmbH, Eschenstr. 55, 31224 Peine		Förderkennzeichen: 02 E 11658B	
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Aktualisierung der Sicherheits- und Nachweismethodik für die HAW-Endlagerung im Tongestein in Deutschland (ANSICHT II), Teilprojekt B			
Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit Bereich C3: Sicherheitsnachweis, Feld: 3.2			
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2018 bis 30.04.2022		Berichtszeitraum: 01.07.2021 bis 31.12.2021	
Gesamtkosten des Vorhabens: 609.290,12 EUR		Projektleiter: Jobmann	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Um die im Rahmen des Vorhabens ANSICHT entwickelte Nachweismethodik zu prüfen, sollen im Rahmen dieses Vorhabens noch ausstehende Einzelnachweise demonstrativ dargestellt und damit die Nachweisführung illustriert werden. Offene Fragen im Nachweissystem, die zur einwandfreien Nachweisführung geklärt werden müssen, sollen identifiziert und klar dargestellt werden. Ziel ist es, durch die Gesamtschau der Einzelnachweise die in ANSICHT entwickelte Nachweismethodik zu evaluieren, ggf. Schwachstellen aufzuzeigen und Verbesserungsansätze zu liefern. Darüber hinaus soll diese Betrachtung aufzeigen, welche Daten, im Rahmen einer Standorterkundung, zielgerichtet erhoben werden müssen, damit ein Nachweis in geeigneter Weise geführt werden kann.

Um diese Ziele zu erreichen, werden sämtlicher Einzelnachweise, die für ein komplettes geotechnisches Barrierensystem im Tonstein durchgeführt werden müssten, illustrativ ausgeführt. Gegebenenfalls werden Anpassungen an den Konzepten vorgenommen, die eine verbesserte Nachweisführung erlauben.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Darstellung und Evaluierung des Integritätsnachweises für die geologische Barriere (Federführung BGR)
- AP2: Darstellung und Evaluierung der Integritätsnachweise für das (geo)technische Barrierensystem (Federführung BGETEC)
- AP3: Darstellung des radiologischen Nachweises am Rand des ewG (Federführung GRS)
- AP4: Berichtswesen (Federführung (BGETEC)

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im Rahmen des AP4 wurden im Berichtszeitraum Einzelnachweise zur Filterstabilität von Barrierekomponenten aktualisiert.

Der Schwerpunkt der Arbeiten lag auf der Illustration der Integritätsbewertung des für die Einlagerung von hoch-radioaktiven Abfällen angenommenen Behälters. Als Grundlage zur Integritätsbewertung wurde die Richtlinie des Forschungskuratoriums für Maschinenbau gewählt. Die darauf basierenden Berechnungen haben gezeigt, dass die Behälter für die geplanten Einlagerungskonzepte, unter den gegebenen Randbedingungen, als sicher und damit als integer eingestuft werden können.

Für die Einlagerung im Tongestein wurde gezeigt, dass der Behälter die mechanischen Lasten mit hohem Sicherheitsfaktor erträgt. Jedoch muss für die gemäß den Sicherheitsanforderungen zu betrachtende Rückholung der Behälter die Geometrie des Tragzapfens angepasst werden. Der Zapfen ist bei der Rückholung mechanisch komplett ausgelastet. Es ist keine Sicherheitsreserve mehr vorhanden. Es wird vorgeschlagen, Versuche durchzuführen, um die tatsächlichen Auszugkräfte bei einer möglichen Rückholung zu ermitteln. Der Unsicherheitsfaktor bei den Lasten zur Rückholung wird als hoch eingestuft und es besteht die Gefahr, dass der Zapfen bei der Rückholung reißt, wenn der Quarzsand in dem der Behälter eingebettet ist, sich stark verdichtet hat.

Die Fertigung des Behälters wird grundsätzlich als machbar eingestuft. Die Herstellbarkeit wäre damit gegeben. Es muss jedoch ermittelt werden, welches Fertigungsverfahren sich als das prozesssicherste mit der besten Wirtschaftlichkeit herausstellt.

4. Geplante Weiterarbeiten

Dokumentation der Ergebnisse in einem Abschlussbericht.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Folgender Bericht wurde im Entwurf erstellt:

Wunderlich, A., Jobmann, M., Leon Vargas, R. P. & Seidel, D. (2021): Analysen zur Integrität der technischen und geotechnischen Barrieren eines HAW Endlagers im Tongestein in Deutschland, Forschungsprojekt ANSICHT-II, Technischer Bericht BGETEC 2021-22, BGE TECHNOLOGY GmbH, Peine

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 11668A
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Smart-K _d in der Langzeitsicherheitsanalyse - Anwendungen (SMILE), Teilprojekt A		
Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit Bereich C3: Sicherheitsnachweis, Feld: 3.2		
Laufzeit des Vorhabens: 01.09.2018 bis 31.05.2024	Berichtszeitraum: 01.07.2021 bis 31.12.2021	
Gesamtkosten des Vorhabens: 1.249.122,00 EUR	Projektleiter: Dr. Noseck	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Verbundprojekt SMILE (Partner: Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e.V. (HZDR) und Institut für Nukleare Entsorgung des KIT (KIT-INE)) basiert auf den Erkenntnissen der Vorhaben ESTRAL und WEIMAR, in denen das Smart-K_d Konzept für Langzeitsicherheitsanalysen entwickelt, optimiert und in das Rechenprogramm r³t implementiert wurde. In SMILE sollen (i) das bisher entwickelte Konzept um den Einfluss von Redoxreaktionen erweitert, (ii) die chemische Beschreibung durch die Ermittlung der Stöchiometrie, Struktur und thermodynamischer Parameter wichtiger Oberflächenkomplexe weiter untermauert, (iii) unterschiedliche State-of-the-art Oberflächenkomplexmodelle zur Auswertung von vorhandenen experimentellen Daten angewandt, (iv) die Sorptions-Datenbasis durch geeignete Batch- und Säulenexperimente weiter ergänzt und (v) das Konzept durch gezielte Experimente und Modellierung von naturnahen Systemen kritisch überprüft werden. Das hier zu entwickelnde Konzept wird sowohl auf andere Formationen als auch auf andere Codes übertragbar sein und somit auch einen Wissenstransfer zu anderen Forschungsfeldern gestatten.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Konzepterweiterung
(Weiterentwicklung des konzeptuellen Modells: Implementierung von Redox-Prozessen, Erarbeitung eines Konzepts zur Berücksichtigung organischer Liganden)
- AP2: Verifizierung des erweiterten WEIMAR-Konzepts
(Vergleichsrechnungen für einfache Testfälle mit PHREEQC bzw. PHAST)
- AP3: Titrations-, Sorptions- und Transportexperimente
(Durchführung von Laborexperimente u. a. im Rahmen von Bachelor-/Masterarbeiten)
- AP4: Parametrisierung und Berechnung von Smart-K_d-Matrizen
(Ableitung thermodynamischer Sorptionsdaten und K_d-Berechnung für das erweiterte Konzept)
- AP5: Großräumige Anwendungsrechnungen
(Strömungs- und Transportrechnungen für ausgewählte Modellgebiete)
- AP6: Qualitätsmanagement/Dokumentation/Internetseite

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP1: Abschluss der Arbeiten zur Implementierung von chemischen Prozessen in d³f⁺⁺. Zusammenstellung und Diskussion anderer Möglichkeiten zur Implementierung von Redoxprozessen.
- AP2: Simulationsrechnungen mit d³f⁺⁺ und PHAST für den Testfall „Aluminium“. Debugging des Codes in Zusammenarbeit mit G-CSC. Regelmäßige Arbeitstreffen mit HZDR zur Verbesserung der Testfälle und der Datenbasis. Entwicklung des Testfalls „Calcite depletion“.
- AP3: Planung und Durchführung der Bestimmung von Sorptionsisothermen zum Kationenaustausch von Muskovit.
Planung und Durchführung von Batchversuchen zum Sorptionsverhalten von Ni an Quarz in Konkurrenz mit Eu.
Planung und Durchführung von Batchversuchen zur Sorption von Europium am synthetischen Sediment zur Erweiterung der Datenbasis.
- AP5: Festlegung des zu betrachtenden Szenarios und der Randbedingungen zur Simulation großräumiger Strömungs- und Transportvorgänge mit dem neuen Konzept.
- AP6: Projekttreffen mit HZDR und KIT-INE (online). Pflege der Internet-Präsenz.

4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1: Dokumentation der Arbeiten zur Implementierung der geochemischen Prozesse und einer Strategie zur weiteren Vorgehensweise.
- AP2: Fortführung der Arbeiten zum Testfall „Aluminium“. Durchführung von Simulationen zum Testfall „Calcite depletion“
- AP3: Planung und Durchführung der Bestimmung von Sorptionsisothermen zum Kationenaustausch von Muskovit. Bestimmung von Selektivitätskoeffizienten für relevante Kationen und Europium.
Auswertung der Säulenexperimente zum Transport von Europium in Säulen mit synthetischen Sedimenten (80 % Quarz, 10 % Orthoklas, 10 % Muskovit) unter Einbeziehung der neu bestimmten Selektivitätskoeffizienten für Muskovit.
- AP5: Durchführung und Dokumentation der großräumigen Strömungs- und Transportrechnungen unter Anwendung des neuen Konzepts. Überprüfung der Ergebnisse hinsichtlich der Einflüsse verschiedener klimatischer Zustände auf die Radionuklidrückhaltung.
- AP6: Projekttreffen mit HZDR und KIT-INE (online) zur Erstellung des Projektabschlussberichts.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e. V., Bautzner Landstr. 400, 01328 Dresden		Förderkennzeichen: 02 E 11668B
Verbundprojekt: Smart-K _d in der Langzeitsicherheitsanalyse - Anwendungen (SMILE), Teilprojekt B		
Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit Bereich C3: Sicherheitsnachweis, Feld: 3.2		
Laufzeit des Vorhabens: 01.09.2018 bis 28.02.2022	Berichtszeitraum: 01.07.2021 bis 31.12.2021	
Gesamtkosten des Vorhabens: 580.851,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Brendler	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Verbundprojekt SMILE (Partner: Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Braunschweig, und Institut für Nukleare Entsorgung des KIT (KIT-INE)) basiert auf den Erkenntnissen der Vorhaben ESTRAL und WEIMAR, in denen das Smart-K_d Konzept für Langzeitsicherheitsanalysen entwickelt, optimiert und in das Rechenprogramm r³t implementiert wurde. In SMILE sollen (i) das bisher entwickelte Konzept um den Einfluss von Redoxreaktionen erweitert, (ii) die chemische Beschreibung durch die Ermittlung der Stöchiometrie, Struktur und thermodynamischer Parameter wichtiger Oberflächenkomplexe weiter untermauert, (iii) unterschiedliche State-of-the-art Oberflächenkomplexmodelle zur Auswertung von vorhandenen experimentellen Daten angewandt, (iv) die Sorptions-Datenbasis durch geeignete Batch- und Säulenexperimente weiter ergänzt und (v) das Konzept durch gezielte Experimente und Modellierung von naturnahen Systemen kritisch überprüft werden. Das hier entwickelte Konzept ist sowohl auf andere Formationen als auch auf andere Codes übertragbar und gestatte somit auch einen Wissenstransfer zu anderen Forschungsfeldern.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Konzepterweiterung
(Weiterentwicklung des konzeptuellen Modells: Implementierung von Redox-Prozessen, Erarbeitung eines Konzepts zur Berücksichtigung organischer Liganden)
- AP2: Verifizierung des erweiterten WEIMAR-Konzepts
(Vergleichsrechnungen für einfache Testfälle mit PHREEQC bzw. PHAST)
- AP3: Titrations-, Sorptions- und Transportexperimente
(Durchführung von Laborexperimente u. a. im Rahmen von Bachelor-/Masterarbeiten)
- AP4: Parametrisierung und Berechnung von Smart-K_d-Matrizen
(Ableitung thermodynamischer Sorptionsdaten und K_d-Berechnung für das erweiterte Konzept)
- AP5: Großräumige Anwendungsrechnungen
(Strömungs- und Transportrechnungen für ausgewählte Modellgebiete)
- AP6: Qualitätsmanagement/Dokumentation/Internetseite

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP2: Vergleichsrechnungen für einfache Testfälle mit PHREEQC bzw. PHAST erfolgten, anschließend wurden die Testfälle optimiert
Optimierung der Implementierung des Smart K_d -Konzeptes in OpenGeoSys
- AP3: Abschluss der Untersuchungen zur Sorption von M^{3+} auf der Muskovit(001)-Basalfläche in Gegenwart von Sulfat, Veröffentlichung eines Manuskripts
Gesamtsicht der Daten zur M^{3+} Sorption an Muskovit, Validierungsrechnungen, Erstellung eines Manuskripts
Fertigstellung des SCM für Ca-Feldspäte und Erstellung eines Manuskripts
- AP4: Erstellung neuer Smart- K_d -Matrizen auf Basis eines Updates von SMILE.dat inklusive verbesserter Werte für spezifische Oberflächen
- AP6: Online-Projekttreffen mit den Verbundpartnern GRS und KIT-INE, Update der Internet-Präsenz unter „www.smartkd-concept.de“

4. Geplante Weiterarbeiten

- AP3: Messungen zur Protolysekonstante des Ca-Feldspats, Fertigstellen des Manuskripts und Veröffentlichung der Ergebnisse
Anpassung des SCM für Muskovit bzgl. Oberflächenpräzipitate, Fertigstellung des Manuskripts
- AP6: Projekttreffen mit GRS und KIT-INE (online), Erarbeitung Abschlussbericht, kontinuierliche Pflege der Internet-Präsenz

5. Berichte, Veröffentlichungen

- Neumann, J., Qiu, C., Eng, P., Skanthakumar, S., Soderholm, L., Stumpf, T. Schmidt, M. (2021): Effect of Background Electrolyte Composition on the Interfacial Formation of Th(IV) Nanoparticles on the Muscovite (001) Basal Plane, *Journal of Physical Chemistry C* 125 (2021), 16524-16535
- Neumann, J.; Lee, S. S.; Brinkmann, H.; Eng, P.; Stubbs, J.; Stumpf, T.; Schmidt, M. (2022): Impact of Ion-Ion Correlations on the Adsorption of M(III) (M = Am, Eu, Y) onto Muscovite (001) in the Presence of Sulfate, *Journal of Physical Chemistry C* 126, 1400-1410
- Lessing, J.; Neumann, J.; Bezzina, J. P.; Bok, F.; Lützenkirchen, J.; Brendler, V.; Stumpf, T.; Schmidt, M.: Spectroscopic and modeling study of the sorption of Ln^{3+} (Eu) and An^{3+} (Am, Cm) on Ca-feldspars. *TransRet2020*, 12.-13.10.2021, Karlsruhe
- Neumann, J.; Brinkmann, H.; Britz, S.; Lützenkirchen, J.; Bok, F.; Stockmann, M.; Brendler, V.; Stumpf, T.; Schmidt, M.: f-element sorption onto K-feldspar – A comprehensive characterization of mechanism and thermodynamics, *Goldschmidt Konferenz*, 04.-09.07.2021, Lyon
- Stockmann, M.; Lu, R.; Gehrke, A.; Montoya, V.; Noseck, U.; Brendler, V.: Radionuclide transport modelling: The Smart K_d -concept in reactive transport codes, *TransRet2020 Workshop*, 12.-13.10.2021, Karlsruhe
- Neumann, J., Lessing, J., Demnitz, M., Eng, P.J., Stubbs, J.E., Stumpf, T., Schmidt, M.: Structural Investigation of the Adsorption von Y(III) on Orthoclase (001) Single Crystals using Resonant Surface X ray Diffraction, *TransRet2020 Workshop*, 12.-13.10.2021, Karlsruhe

Zuwendungsempfänger: Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie(KIT), Hermann-von-Helmholtz-Platz 1, 76344 Eggenstein-Leopoldshafen		Förderkennzeichen: 02 E 11668C
Verbundprojekt: Smart-K _d in der Langzeitsicherheitsanalyse - Anwendungen (SMILE), Teilprojekt C		
Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit Bereich C3: Sicherheitsnachweis, Feld: 3.2		
Laufzeit des Vorhabens: 01.09.2018 bis 28.02.2022	Berichtszeitraum: 01.07.2021 bis 31.12.2021	
Gesamtkosten des Vorhabens: 117.142,34 EUR	Projektleiter: Dr. Lützenkirchen	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Verbundprojekt SMILE (Partner: Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e.V. (HZDR) und Institut für Nukleare Entsorgung des KIT (KIT-INE)) basiert auf den Erkenntnissen der Vorhaben ESTRAL und WEIMAR, in denen das Smart-K_d Konzept für Langzeitsicherheitsanalysen entwickelt, optimiert und in das Rechenprogramm r³t implementiert wurde. In SMILE sollen (i) das bisher entwickelte Konzept um den Einfluss von Redoxreaktionen erweitert, (ii) die chemische Beschreibung durch die Ermittlung der Stöchiometrie, Struktur und thermodynamischer Parameter wichtiger Oberflächenkomplexe weiter untermauert, (iii) unterschiedliche State-of-the-art Oberflächenkomplexmodelle zur Auswertung von vorhandenen experimentellen Daten angewandt, (iv) die Sorptions-Datenbasis durch geeignete Batch- und Säulenexperimente weiter ergänzt und (v) das Konzept durch gezielte Experimente und Modellierung von naturnahen Systemen kritisch überprüft werden. Das hier zu entwickelnde Konzept wird sowohl auf andere Formationen als auch auf andere Codes übertragbar sein und somit auch einen Wissenstransfer zu anderen Forschungsfeldern gestatten.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Konzepterweiterung
(Weiterentwicklung des konzeptuellen Modells: Implementierung von Redox-Prozessen, Erarbeitung eines Konzepts zur Berücksichtigung organischer Liganden)
- AP2: Verifizierung des erweiterten WEIMAR-Konzepts
(Vergleichsrechnungen für einfache Testfälle mit PHREEQC bzw. PHAST)
- AP3: Titrations-, Sorptions- und Transportexperimente
(Durchführung von Laborexperimente u. a. im Rahmen von Bachelor-/Masterarbeiten)
- AP4: Parametrisierung und Berechnung von Smart-K_d-Matrizen
(Ableitung thermodynamischer Sorptionsdaten und K_d-Berechnung für das erweiterte Konzept)
- AP5: Großräumige Anwendungsrechnungen
(Strömungs- und Transportrechnungen für ausgewählte Modellgebiete)
- AP6: Qualitätsmanagement/Dokumentation/Internetseite

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP3: Geplante Besuche konnten wegen CORONA weiterhin nicht durchgeführt werden. Inzwischen wurden Daten aus den EXAFS Messungen ausgewertet und interpretiert. Demnach bildet sich ein mononuklearer-bidentater Oberflächenkomplex zwischen Europium und den untersuchten SiO₂ Oberflächen.

Die Adsorption von Eu an Feldspäten wurde interpretiert und der Einfluss von gelöstem Aluminium (aus der Auflösung der Feststoffe) wurden verifiziert. Es wurden Ideen entwickelt, wie dieser Einfluss in Modellen abgebildet werden kann.

Erste Ergebnisse zum Säure-Base Verhalten von Anorthit in CaCl₂ Lösungen wurden mit potentiometrischen Titrations erhalten. Es wurde begonnen, Korngrößen des Anorthits zu separieren, mit denen Strömungspotentialmessungen und Säulentitrations durchgeführt werden können. Für die Säulentitrations reichen die derzeitig synthetisierten Mengen nicht aus. Daher soll mehr Anorthit hergestellt werden.

Die verschiedenen Fraktionen müssen zudem separat charakterisiert werden, insbesondere auch bezüglich der jeweiligen spezifischen Oberflächen.

Langzeitequilibration einer Quarz-Säule, damit Titrations- und Eu-Migrationsversuche mit equilibrierter Lösung durchgeführt werden können.

AP3: Virtuelles (jährliches) Projekt Meeting zu allen Arbeitspaketen.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Weiterführung der experimentellen Arbeiten (Laser-Spektroskopie an Proben aus Säulenversuchen und Batchversuchen).
- Verwendung des Adsorptionsmodells für Eu an Orthoklas zur Simulation der vorhandenen Säulendaten.
- Simulation der Daten für Quartz (Batch und Säule).
- Design von Eu- und Ni- Adsorptionsmodellen für Quartz/Sand und anschließende Simulation der Säulendaten.
- Bestimmung der Säure-Base Eigenschaften von Anorthit (Besuch einer Studentin von HZDR). Synthese von größeren Mengen Anorthit, die es erlauben.
- Entwicklung eines Modells für Anorthit (Ladungsmodell und Adsorptionsmodell) zur Modellierung von Batch- und Säulendaten.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Neumann, J; Brinkmann, H; Britz, S; Lützenkirchen, J; Bok, F; Stockmann, M; Brendler, V; Stumpf, T; Schmidt, M: A comprehensive study of the sorption mechanism and thermodynamics of f-element sorption onto K-feldspar. *Journal of colloid and interface science*, 591 (2021) 490-499, DOI:10.1016/j.jcis.2020.11.04

Zuwendungsempfänger: Technische Universität Clausthal, Adolf-Römer-Str. 2a, 38678 Clausthal-Zellerfeld		Förderkennzeichen: 02 E 11688
Vorhabensbezeichnung: Langzeitsicheres Abdichtungselement aus Salzschnittblöcken - Durchführung, Auswertung und Reanalyse von THM-Versuchen (Salzschnittblöcke III)		
Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte, Feld: 2.3		
Laufzeit des Vorhabens: 01.09.2018 bis 31.08.2022	Berichtszeitraum: 01.07.2021 bis 31.12.2021	
Gesamtkosten des Vorhabens: 616.650,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Düsterloh	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Durchführung, Auswertung und numerisch-rechnerische Reanalyse von Technikumsversuchen an Großprüfkörpern aus Salzschnittblöcken mit und ohne Fugenfüllung zur Untersuchung der Dicht- und Tragwirkung des Systems unter in situ relevanten THM-Belastungen. Bezug zu anderen Vorhaben: Für die Reanalyse von Abdichtungssystemen aus Salzschnittblöcken mit Fugenfüllung aus Salzgrus werden die im Rahmen des Forschungsvorhabens KOMPASS (02E11708D) erarbeiteten Ergebnisse zur stoffmodelltheoretischen Charakterisierung von Salzgrus integriert.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP1: Beschaffung von gewachsenem Steinsalz

AP2: Herstellung von Salzschnittblöcken

AP3: Durchführung und Auswertung von Technikumsversuchen unter variierten THM-Beanspruchungen

AP4: Rechnerische Reanalyse der Technikumsversuche mit Verifikation, Validation und Ertüchtigung/Erweiterung der Berechnungssoftware

AP5: Erstellung Schlussbericht

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1: abgeschlossen.

AP2: Fertigstellung von Salzschnittblöcken für einen zweiten Prüfkörper mit gleicher Konfiguration der Salzschnittblock-Konstruktion (ohne Fugenfüllung).

Weitere Herstellung von Salzschnittblöcken für einen weiteren Prüfkörper mit Fugenfüllung.

AP3: Auswertung des mechanischen Kompaktionsversuchs für den ersten Prüfkörper unter eingeschränkter Axialdehnung mit einer vorgegebenen Axialdeformationstoleranz und einer konstanten Mantelspannung von 12,5 MPa sowie des hydromechanischen Kompaktionsversuchs unter nahezu isotropen Belastungsrandbedingungen mit zweistufiger konstanter Mantelspannung von 12,5 / 8,5 MPa und entsprechender konstanter Axialspannung von 13 / 9 MPa mit gleichzeitiger Durchführung einer Gaspermeabilitätsuntersuchung mit verschiedenen Gasdruckgradienten.

Herstellung eines zweiten Prüfkörpers aus den vorgefertigten Salzschnittblöcken. Herstellung von Bohrungen in der obersten und untersten SSB-Schicht mit einer Bohrungstiefe von 10 cm (Höhe der SSB-Schicht) für den zweiten Prüfkörper.

Durchführung des Versuchs mit dem zweiten Prüfkörper mit gleicher Konfiguration der Salzschnittblock-Konstruktion (ohne Fugenfüllung): mechanischer Kompaktionsversuch für den

zweiten Prüfkörper unter eingeschränkter Axialdehnung mit einer vorgegebenen Axialdeformationstoleranz und einer konstanten Mantelspannung von 4 MPa (1. Stufe Versuchsdauer 14 d) und 8 MPa (2. Stufe Versuchsdauer aktuell 70 d), anschließend hydromechanischer Kompaktionsversuch unter TC-Belastungsrandbedingungen mit konstanter Mantelspannung von 8 MPa und entsprechender konstanter Axialspannung von 11,7 MPa mit gleichzeitiger Durchführung einer Gaspermeabilitätsuntersuchung mit verschiedenen Gasdruckgradienten zur Kontrolle des Zustands/des Permeabilitätsverhaltens der Probe.

AP4: Rechnerische Simulationen zur Laborversuchsanalyse (mit Anwendung von C-WIPP-TUC-2021 für Salzgrusmaterialverhalten):

- Hydromechanisch gekoppelte Simulationen mit dem Berechnungsmodell mit einer Höhe von 0,3 m und einer Fugenbreite von 5 mm in FLAC3D-TOUGH3 und Vergleich zu den Ergebnissen in FLAC3D-TOUGH2.
- Hydromechanisch gekoppelte Simulationen mit dem Berechnungsmodell mit einer Höhe von 1,5 m und einer Fugenbreite von 5 mm in FLAC3D-TOUGH3 und Vergleich zu den Ergebnissen in FLAC3D-TOUGH2.
- Hydromechanisch gekoppelte Simulationen mit dem Berechnungsmodell mit einer Höhe von 0,3 m und einer Fugenbreite von 0,1 mm in FLAC3D-TOUGH3.
- Hydromechanisch gekoppelte Simulationen mit dem Berechnungsmodell mit einer Höhe von 1,5 m und einer Fugenbreite von 0,1 mm in FLAC3D-TOUGH3.

Simulationen einer In-situ-Situation – Schachtmodell (mit Anwendung von C-WIPP-TUC-2021 für Salzgrusmaterialverhalten):

Erste Kontrolle der rechnerischen Richtigkeit der Simulation mit einem Schachtmodell mit Verfüllung (identisch zu SSB-Konstruktion im Labor) unter mechanischen und hydromechanisch gekoppelten Randbedingungen in FLAC3D-TOUGH3.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP2: Weitere Herstellung von Salzschnittblöcken für den dritten Prüfkörper mit Fugenfüllung.

AP3: Weitere Durchführung und Auswertung des zweiten Prüfkörpertests mit Konfiguration der Salzschnittblock-Konstruktion ohne Fugenfüllung. Fortsetzung des mechanischen Kompaktionsversuchs für den zweiten Prüfkörper unter eingeschränkter Axialdehnung mit einer vorgegebenen Axialdeformationstoleranz und einer konstanten Mantelspannung von 12,5 MPa sowie Durchführung eines hydromechanischen Kompaktionsversuchs unter nahezu isotropen Belastungsrandbedingungen mit einstufiger konstanter Mantelspannung von 12,5 / 8,5 MPa und entsprechender konstanter Axialspannung von 13/9 MPa mit gleichzeitiger Durchführung einer Gaspermeabilitätsuntersuchung mit verschiedenen Gasdruckgradienten. Durchführung eines dritten Versuchs für den dritten Prüfkörper mit Fugenfüllung.

AP4: Fortführung der hydromechanisch gekoppelten Simulationen mit dem Berechnungsmodell mit einer Höhe von 1,5 m und einer Fugenbreite von 0,1 mm in FLAC3D-TOUGH3. Fortführung der rechnerischen Simulationen mit einem Schachtmodell mit Verfüllung (identisch zu SSB-Konstruktion im Labor) unter mechanischen und hydromechanisch gekoppelten Randbedingungen in FLAC3D-TOUGH3.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Poster und Abstract (Interdisciplinary research symposium on the safety of nuclear disposal practices safeND 2021): Pilot plant tests to demonstrate the functionality of sealing elements made of salt cut bricks

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 11698
Vorhabensbezeichnung: Untersuchung thermisch-hydraulisch-mechanisch-chemischer Einwirkungen auf zementbasierte Dichtelemente (THYMECZ)		
Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte, Feld: 2.3		
Laufzeit des Vorhabens: 01.09.2018 bis 31.08.2022	Berichtszeitraum: 01.07.2021 bis 31.12.2021	
Gesamtkosten des Vorhabens: 2.142.267,00 EUR	Projektleiter: Dr. Meyer	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Ziel des Vorhabens ist die systematische Untersuchung der thermischen, hydraulischen, mechanischen und chemischen Prozesse (THMC-Prozesse), die sich auf die Integrität eines Abdichtungselements bzw. des gesamten Abdichtsystems in einem Endlager auswirken können. Aufbauend auf den Erkenntnissen zahlreicher Pilotversuche an kombinierten Prüfkörpern aus Salzbeton und Steinsalz, die im Rahmen von LAVA-2 und LASA-EDZ gewonnen wurden, sollen, anhand systematisch aufgebauter Versuchsreihen, einzelne/gekoppelte THMC-Prozesse untersucht und die daraus resultierende Wirkung auf die Integrität der geotechnischen Barriere herausgearbeitet werden.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Bereitstellung von Material und Methoden
- AP2: HC-Untersuchungen
- AP3: HMC-Untersuchungen
- AP4: THC-Versuche
- AP5: TM-Versuche
- AP6: THMC-Versuche
- AP7: Modelltheoretische Untersuchungen
- AP8: Dokumentation
- AP9: Analyse von Salzprüfkörper aus der WIPP
- AP10: Langzeitkorrosionsexperimente

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP1: In diesem Arbeitspaket erfolgt die Zusammenstellung bzw. Entwicklung geeigneter Untersuchungsmethoden basierend auf vorlaufenden FuE-Vorhaben. Die Treffen des Arbeitskreises Betonkorrosion (AKB) im Jahr 2021 wurden aufgrund von Corona ausgesetzt, ein nächstes Treffen ist als VK im März 2022 geplant.
- AP2: Die Versuche im AP2 wurden mittlerweile in die Langzeitkorrosionsexperimente in AP10 überführt, um die langfristige Untersuchung der Materialien im Kontakt zu salinaren Lösungen beobachten zu können. Es erfolgen zurzeit noch die Messung der reinen Salzzylinder mit IP21-Lösung.

- AP3: Die Versuche der kombinierten A1 Proben im AP3 sind abgeschlossen worden. Die Permeabilitäten der vorkompaktierten kombinierten A1 Probekörper sind im weiteren Versuchsverlauf nicht weiter angestiegen.
- AP4: Die Ergebnisse der ersten Untersuchungen an den monolithischen Probekörpern des A1 im Kontakt mit NaCl-Lösung sollten in dem zurückliegenden Zeitraum bestätigt werden, wiederum war ein Lösungsdurchbruch nach ca. 90 Tagen zu beobachten. Die restlichen Proben wurden in die Langzeitkorrosionsexperimente AP10 überführt.
- AP5: Die im AP5 vorgesehenen Versuche wurden bereits erfolgreich abgeschlossen.
- AP6: Der Aufbau des THMC-Messstandes konnte abgeschlossen werden, ein Temperaturfühler und ein Druckaufnehmer je Autoklave befinden sich noch in der Beschaffung. Zurzeit wird eine kombinierte Probe des A1 untersucht.
- AP7: Das Modellverständnis der Korrosionsprozesse soll mit Hilfe der durchgeführten Experimente, im Besonderen auch der durchgeführten Langzeitversuche, vertieft werden. Mit Hilfe von Langzeitkorrosionsexperimenten soll zunächst der Chemismus der stattfindenden Reaktionen experimentell und anschließend modelltheoretisch mit Hilfe einer geeigneten Datenbasis (THEREDA) untersucht werden.
- AP8: Erstellung der Dokumente zur Qualitätssicherung der Arbeiten im Projekt sowie die Erstellung des HJB und JB.
- AP9: Die Prüfkörper konnten nicht zur Verfügung gestellt werden, daher wurde dieses AP zurückgestellt.
- AP10: Bei den Langzeitkorrosionsexperimenten ist bereits die 4. Stufe erreicht, wobei eine deutliche Abnahme der jeweils resultierenden Lösungsmenge beobachtet worden ist. Zurzeit wird davon ausgegangen, dass ca. 7 Stufen erreicht werden können. Bei den HC-Versuchen, die in die Langzeitkorrosionsversuche überführt worden waren, konnten bei dem Baustoff A1 im Kontakt zu NaCl-Lösung die Ergebnisse der kurzfristigen THC-Versuche ca. (90 Tage) nach ca. 700 Tagen bestätigt werden, auch hier konnte ein Lösungsdurchbruch beobachtet werden.

4. Geplante Weiterarbeiten

Im folgenden HJ werden die Messungen an dem THMC-Messstand an den vorgesehenen Systemen fortgeführt. Im ersten HJ sollen bei allen Proben der HC-Untersuchungen die Permeabilitäten an dem Probeneingang gemessen werden. Die Langzeitkorrosionsexperimente werden fortgesetzt.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Technische Universität Clausthal, Adolph-Roemer-Str. 2a, 38678 Clausthal-Zellerfeld		Förderkennzeichen: 02 E 11748A
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Strömungstechnischer Funktionsnachweis für Verschlussbauwerke und flüssigkeitsgestützte Abdichtung des Kontaktbereiches - Phase III: Vertiefung Kenntnisstand Kontaktbereich & Injektionsmittel, In-situ-Versuche (STROEFUN III), Teilprojekt A		
Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte, Feld: 2.3		
Laufzeit des Vorhabens: 01.01.2019 bis 30.06.2022	Berichtszeitraum: 01.07.2021 bis 31.12.2021	
Gesamtkosten des Vorhabens: 1.727.898,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Langefeld	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das übergeordnete Ziel dieses Vorhabens ist es, den Verschluss von hochradioaktiven Abfällen in einem Bergwerk sicher zu gestalten. Die Kenntnisse zur Verdichtung der Auflockerungszonen im Kontaktbereich zwischen Wirtsgestein und Dammbauwerk sind von Bedeutung, um eine sichere Endlagerung von hochradioaktiven Abfällen im salinaren Milieu gewährleisten zu können.

Vorausgegangen sind diesem Projekt die „Strömungstechnischer Funktionsnachweis für Verschlussbauwerke im Steinsalz und deren flüssigkeitsgestützte Abdichtung– Phase I (Konzeption von Funktionsnachweis und Abdichtungsmethoden, Testung und Auswahl von Behandlungsfluiden)“ mit dem FKZ 02E11253 sowie der „Strömungstechnischer Funktionsnachweis für Verschlussbauwerke und flüssigkeitsgestützte Abdichtung des Kontaktbereiches – Phase II (Vertiefung Kenntnisstand Kontaktbereich & Injektionsmittel) mit dem FKZ 02E11597. Diese Projekte lieferten das Basiswissen, auf welchem in diesem Projekt aufgebaut wird.

Im Rahmen dieses Projektes wird die In-situ-Testung des Konzeptes für eine gegenständliche Nachweisführung der strömungstechnischen Dichtwirkung eines Bauwerkes in der vierten Projektphase vorbereitet. Das Nachweiskonzept ist prinzipiell für verschiedene Wirtsgesteine geeignet. Entsprechend der Ausrichtung der Untersuchungen in den ersten beiden Projektphasen und dem Bezug zu den deutschen Endlagern im Salinargebirge werden die Untersuchungen in der dritten Projektphase ebenfalls auf Verschlussbauwerke im Salinargebirge ausgerichtet.

Folgende Untersuchungen sollen in diesem Projekt vor Ort durchgeführt und weitere Erkenntnisse gewonnen werden:

- geophysikalische Untersuchungen zur Beurteilung der differenzierten Vorgänge und Parameterverteilung im Kontaktbereich Dichtbaustoff/Gebirge
- Entwicklung und Testung ausgewählter Komponenten und Materialien eines In-situ-Versuches im halbertechnischen Maßstab -> u. a. Ringkammern, Bohrungsführung, Mehrfachpacker
- Auswahl, Parametrisierung und Vorgaben zur Qualitätssicherung für d. Einbau d. Dichtbaustoffes.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP1: Kontaktbereich – Vertiefung Kenntnisstand

Durch Laboruntersuchungen soll der Kontaktbereich zwischen Bauwerk und Gebirge genauer untersucht werden.

AP2: Materialuntersuchungen

In Abhängigkeit von den Randbedingungen, wie das geochemische Milieu oder der zu injizierende Porenraum, werden unterschiedliche Injektionsmittel auf Ihre Verwendbarkeit getestet.

- AP3: Vorversuche zur Konzipierung der Versuchsinstallation
Die Voruntersuchungen beinhalten die Konzipierung, den Bau und die Testung von Installationskomponenten und die vorbereitende Klärung von Detailfragen für die Installation, Testung und Prozessbeurteilung.
- AP4: In-situ-Voruntersuchungen
Die Erkenntnisse aus den vorherigen Arbeitspaketen werden in diesem Arbeitspaket aufgegriffen und dienen als Grundlage für die Durchführung von Handhabungs- und vereinfachten Referenzversuchen an einem in situ errichteten Segment eines Dammbauwerkes.
- AP5: Berichtslegung – Dokumentation, Interpretation, Schlussfolgerungen

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP1: Die integrale Permeabilität des Kontaktbereiches zwischen Baustoff und Gebirge wurde ermittelt und beträgt ca. 10^{-14} m².
- AP2: Mithilfe der Quecksilberdruckporosimetriemessungen wurde die Porosität [%] von Rückstellproben des verwendeten Dichtbaustoffes ermittelt, deren Wert zwischen 13,76 und 14,07 erreichbare Porosität während der Wert der unerreichbaren Porosität [%] zwischen 0,35 und 1,58 schwankt. Die errechnete Porosität, welche sich durch die Massendifferenzen bei einer Trocknung der Proben (45 °C) ergibt, schwankt zwischen 10,3 und 19,0 %.
Die Biegezugfestigkeit des Sorelbetons beträgt 9,7- 13,3 MPa und die einaxiale Druckfestigkeit 42,9- 54,6 MPa.
Die Feuchtigkeit des eingebrachten Sorelbetons schwankt zwischen ca. 3,0 und 4,5 %. Hierbei ist auffällig, dass die höheren Feuchtigkeitwerte in der Mitte des Bauwerkes enthalten sind, während mit zunehmendem Abstand zur Mitte die Lösungsgehalte tendenziell geringer werden. Bei der Errichtung des Dammes ist zu einer Schaumbildung gekommen. Der Schaum, stellt ausgehärtet eine Zone erhöhter Permeabilität dar, die es gilt zu vermeiden. Eine Untersuchung bezüglich dieser Schaumbildung wird erfolgen.
- AP3: Arbeitspaket abgeschlossen.
- AP4: Errichtung des Halbdammes. An unterschiedlichen Position des Bauwerkes wurden Druck und Temperaturentwicklung aufgezeichnet. Die modellgestützte Prognose des Abkühlungsprozesses des Baustoffes stimmte mit den gemessenen Ergebnissen überein. Zur Ermittlung der integralen Permeabilität wurde eine Bohrung vertikal durch die Mitte des Bauwerkes gestoßen. Diese beträgt ca. $3 \cdot 10^{-17}$ m². Die durch die Bohrung gewonnenen Bohrkern geben eine lokale Aussage über die Abbindung des Sorelbetons. Betonierunterbrechungen sowie lokale Zonen höherer Permeabilität sind zu erkennen und werden untersucht. Eine Wegsamkeit zwischen einer Betonierfuge, die eine Zone erhöhter Permeabilität zwischen zwei eingebrachten Sorelzementschichten darstellt, und der Kontur besteht vermutlich nicht.

4. Geplante Weiterarbeiten

In den folgenden Wochen werden die Injektionsmittel in den Kontaktbereich zwischen Dichtbaustoff und Gebirge injiziert und anschließend die integrale Permeabilität der Kontur bestimmt. Es soll eine weitere Bohrung vertikal durch einen Randbereich des Bauwerkes gestoßen werden, um die Erkenntnisse der ersten Bohrung zu verifizieren.
Überbohrung von Dummieleitungen mit anschließender Verfüllung des Hohlraumes und Druckbeaufschlagung zur Überprüfung der Permeabilität in dem Kontaktbereich zwischen alt- und neu eingebrachtem Dichtbaustoff.
Eine Bestandsanalyse der unterschiedlichen Mineralkomplexe wird angestrebt.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e. V., Bautzner Landstr. 400, 01328 Dresden		Förderkennzeichen: 02 E 11748B
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Strömungstechnischer Funktionsnachweis für Verschlussbauwerke und flüssigkeitsgestützte Abdichtung des Kontaktbereiches - Phase III: Vertiefung Kenntnisstand Kontaktbereich & Injektionsmittel, In-situ-Versuche (STROEFUN III), Teilprojekt B		
Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte, Feld: 2.3		
Laufzeit des Vorhabens: 01.01.2019 bis 30.06.2022	Berichtszeitraum: 01.07.2021 bis 31.12.2021	
Gesamtkosten des Vorhabens: 39.015,00 EUR	Projektleiter: Dr. Kulenkampff	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das übergeordnete Ziel dieses Verbundvorhabens ist es, der Endlagerung von hochradioaktiven Abfällen in Deutschland ein Stück näher zu kommen. Die Kenntnisse zur Verdichtung der Auflockerungszonen im Kontaktbereich zwischen Wirtgestein und Dammbauwerk sind elementar um eine sichere Endlagerung von hochradioaktiven Abfällen im salinaren Milieu gewährleisten zu können.

Dieses Projekt baut auf die Ergebnisse zweier Projekte der TU Clausthal auf: „Strömungstechnischer Funktionsnachweis für Verschlussbauwerke im Steinsalz und deren flüssigkeitsgestützte Abdichtung– Phase I (Konzeption von Funktionsnachweis und Abdichtungsmethoden, Testung und Auswahl von Behandlungsfluiden)“ (02E11253) sowie der „Strömungstechnischer Funktionsnachweis für Verschlussbauwerke und flüssigkeitsgestützte Abdichtung des Kontaktbereiches- Phase II (Vertiefung Kenntnisstand Kontaktbereich & Injektionsmittel) (02E11597).

Im Rahmen dieses Projektes wird die In-situ-Testung des Konzeptes für eine gegenständliche Nachweisführung der strömungstechnischen Dichtwirkung eines Bauwerkes in der vierten Projektphase vorbereitet. Das Nachweis-konzept ist prinzipiell für verschiedene Wirtsgesteine geeignet. Entsprechend der Ausrichtung der Untersuchungen in den ersten beiden Projektphasen und dem Bezug zu den deutschen Endlagern im Salinargebirge werden die Untersuchungen in der dritten Projektphase ebenfalls auf Verschlussbauwerke im Salinargebirge ausgerichtet.

Folgende Untersuchungen sollen in diesem Projekt vor Ort durchgeführt und weitere Erkenntnisse gewonnen werden:

- geophysikalische Untersuchungen zur Beurteilung der differenzierten Vorgänge und Parameterverteilung im Kontaktbereich Dichtbaustoff/Gebirge,
- Entwicklung und Testung ausgewählter Komponenten und Materialien eines In-situ-Versuches im halbtechnischen Maßstab -> u. a. Ringkammern, Bohrungsführung, Mehrfachpacker,
- Auswahl, Parametrisierung und Vorgaben zur Qualitätssicherung für den Einbau des Dichtbaustoffes.

Das Teilprojekt des HZDR fokussiert auf die Materialdurchlässigkeit als den entscheidenden Parameter. Aus dem Vergleich von Porenradienverteilungen aus 3D-bildgebenden Verfahren (μ CT) und Hg-Porosimetrie werden robuste Verfahren und Modelle entwickelt, die eine quantitativ zuverlässige Bewertung der strömungswirksamen Porosität des Materials ermöglichen.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Kontaktbereich – Vertiefung Kenntnisstand
Durch Laboruntersuchungen soll der Kontaktbereich zwischen Bauwerk und Gebirge genauer untersucht werden.
- AP2: Materialuntersuchungen
In Abhängigkeit von den Randbedingungen wie das geochemische Milieu, der zu injizierende Porenraum werden unterschiedliche Injektionsmittel auf Ihre Verwendbarkeit getestet werden.
- AP3: Vorversuche zur Konzipierung der Versuchsanstallation
Die Voruntersuchungen beinhalten die Konzipierung, den Bau und die Testung von Installationskomponenten und die vorbereitende Klärung von Detailfragen für die Installation, Testung und Prozessbeurteilung.
- AP4: In-situ-Voruntersuchungen
Die Erkenntnisse aus den vorherigen Arbeitspaketen werden in diesem Arbeitspaket aufgegriffen und dienen als Grundlage für die Durchführung von Handhabungs- und vereinfachten Referenzversuchen an einem in situ errichteten Segment eines Dammbauwerkes.
- AP5: Berichtslegung – Dokumentation, Interpretation, Schlussfolgerungen

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP1: Abbildungen der Porositätsverteilung durch μ CT an generischem Probenmaterial konnten erfolgreich in FEM-Transportmodelle umgesetzt werden.

4. Geplante Weiterarbeiten

Sobald Proben aus dem Bauwerksmaterial zur Verfügung stehen, werden sie mit Hilfe des bewährten Verfahrens untersucht.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Friedrich-Schiller-Universität Jena, Fürstengraben 1, 07743 Jena		Förderkennzeichen: 02 E 11759A
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Grimsel Felslabor: In-situ-Experimente zur Bentonit Langzeit-Stabilität und der Radionuklidmobilität an der Grenzfläche Bentonit - Kristallin (KOLLORADO-e3), Teilprojekt A		
Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte, Feld: 2.3		
Laufzeit des Vorhabens: 01.05.2019 bis 31.12.2022	Berichtszeitraum: 01.07.2021 bis 31.12.2021	
Gesamtkosten des Vorhabens: 375.308,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Schäfer	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Hauptziel des Vorhabens ist es, das mechanistische Verständnis der Prozesse weiter zu vertiefen, die unter naturnahen, endlagerrelevanten Bedingungen in geklüfteten Granitsystemen die Integrität der Bentonitbarriere beeinträchtigen und zu einem kolloidgetragenen Radionuklid (RN)-Transport führen können. Dies umfasst die grundlegenden Mechanismen der Bentoniterosion und Kolloidbildung am Übergang des Bentonit-Versatzes/-Puffers zum Kristallingestein, die RN-Speziation, insbesondere die Wechselwirkungen zwischen RNs und Kolloiden sowie die Wechselwirkungen von gelösten RN und/oder Kolloiden mit den Gesteinsoberflächen. Die geplanten Arbeiten bauen auf den in Kollorado-e2 erzielten Erkenntnissen auf.

Das experimentelle Programm im Labor und im Untertagelabor Grimsel unter Anwendung von spektroskopischen und mikroskopischen Methoden der Partner FSU und KIT-INE soll dazu beitragen, ein verbessertes mechanistisches Verständnis der Integrität der Bentonitbarriere und des kolloidgetragenen RN-Transports zu erreichen. Es soll die Übertragbarkeit der Labordaten auf natürliche Systeme überprüft und Eingangsdaten für die in der Langzeitsicherheitsanalyse von GRS verwendeten Codes CLAY-POS, COFRAME und d^3f^{++} ermittelt werden. Diese Codes sowie von KIT-INE und FSU genutzte gekoppelte reaktive Transportmodelle werden zur Beschreibung der Feldexperimente weiterentwickelt, angewandt und damit weiter qualifiziert.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Experimentelles Programm zum kolloidgetragenen RN-Transport (KIT, FSU)
- AP1.1: Radionuklidtransport in kompaktiertem Bentonit
- AP1.2: Integrität der Bentonitbarriere
- AP1.3: Kolloidgetragener Radionuklidtransport
- AP2: Modellrechnungen zum kolloidgetragenen RN-Transport (GRS, KIT, FSU)
- AP2.1: Benchmarkrechnungen zu thermodynamischen Daten (GRS, KIT, FSU)
- AP2.2: Simulationsrechnungen für das CFM Experiment LIT und Mock-Up Tests (GRS)
- AP2.3: Simulationsrechnungen für bisherige und weitere CFM Feldexperimente (GRS)
- AP2.4: Modellrechnungen/Bewertung des kolloidgetragenen RN Transports (GRS)
- AP3: Integration der Ergebnisse und Abschlussdokumentation (GRS, KIT, FSU)

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1: Zwölf Erosionsexperimenten wurden mit verschiedenen Proben-tabletten von rohem MX-80 Bentonit sowie aufgereinigtem Na-Montmorillonit (Na-Mnt) mit einer gezielten Zugabe von akzessorischem Quarz (10, 20 wt. %), einer Trockendichte von ca. $1,8 \text{ g/cm}^3$ und einer konstanten Fließrate von

50 μ L/min durchgeführt. Die Kontaktlösungen wurden kontinuierlich aufgefangen und standen zur weiteren chemischen und Kolloid-Analytik (NTA) zur Verfügung.

Das erste Experiment (56 Tage Laufzeit) wurde mit regulärem Grimsel Grundwasser (GGW) durchgeführt. Eine nahezu quantitative Auswaschung des Materials der Na-Mnt-Proben mit Konzentrationen von bis zu $1,75\text{E}+11 \pm 2,45\text{E}+09$ Partikeln pro mL wurde dabei beobachtet. Veränderungen der Kontaktlösung ließen sich beobachten und zeigten vor allem zum Zeitpunkt der starken Erosion einen signifikanten Abfall der Ca-Konzentration.

Das Kontaktwasser des zweiten Experiments (119 Tage) wurde durch Zugabe von $\text{CaCl}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$ auf konstant 2 mmol Ca pro L angehoben. Die Erhöhung der Ca-Konzentration im GGW über den kritischen Wert der CCC trug dabei wesentlich zur Stabilisierung des Systems mit Kolloidkonzentrationen von etwa $1,0\text{E}+07 \pm 2,5\text{E}+06$ Partikel pro mL bei. Messungen der Kationenaustauschkapazität (KAK) für verschiedene Abschnitte des aufgequollenen Materials ergaben eine Zunahme dieser von außen nach innen sowie im Zusammenhang mit der Höhe des Mnt-Anteils der Proben. Zudem wurde ein nahezu vollständiger Austausch der ursprünglich verfügbaren Kationen von Natrium zu Calcium beobachtet.

Unter erneuter Verwendung von regulärem GGW, rohem MX-80 Bentonit und einer 80 % Na-Mnt Proben-Tablette sowie zweier GMZ-Bentonite (GMZ-001, GMZ-24-200) aus dem ELF- China Projekt, wurde ein drittes Erosionsexperiment abgeschlossen. Die Quantifizierung der Erosionsmassen ergab eine durchschnittliche Konzentration von $6,2\text{E}+08 \pm 5,0\text{E}+07$ für den rohen MX-80 sowie ca. $3,0\text{E}+09 \pm 1,0\text{E}+08$ Partikeln pro mL für die GMZ Proben.

Fortgesetzt wurde auch die kontinuierliche Probennahme im i-BET Experiment im Rahmen des CFM-Projekts zum Erosionsverhalten von Bara Kade (MX-80) Bentonit und Durchführung sowie Auswertung nasschemischer (ICP-MS, IC) und Kolloidanalysen speziell mittels Nanopartikel-Tracking-Analyse (NTA). Die geplante Probennahme-Strategie des LIT-Bohrkernes verzögerte sich durch den Bau einer geeigneten Säge und dem Zugang zum Felslabor. Ein erstes geschnittenes Segment des Bohrkerens ist nach Dosisleistungsbestimmung durch PSI und KIT-INE an die FSU versandt worden. Zur Koordination wurden mehrere bilaterale online Besprechungen durchgeführt.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP1: Quantitative Charakterisierung der Erosion des im iBET-Experiments eingesetzten MX-80 Montmorillonits (speziell zur gravimetrischen Erosion). Fortführung der Labor-Erosionsexperimente zum Einfluss von akzessorischen Gemengteilen mit Fokus auf Febex Bentonit. Teil-Substitution des Quarzmehls durch Ca-Träger (Gips, Anhydrit) unterschiedlicher Löslichkeit sowie Durchführung weiterer Erosionsexperimente mit Fokus auf in-situ und post-mortem Analysen des Quellverhaltens, des partiell aufgelösten Quelldrucks unter Verwendung verschiedener TekscanTM-Drucksensor-Systeme, der NTA sowie weiterer nasschemischer Analysen. Nach Erhalt von Sub-Samples des geschnittenen LIT-Experiment Kerns (Febex-Bentonit) Untersuchung der Expansionslänge mittels XRM sowie eine mineralogische Charakterisierung der Ton-Gelschicht und dessen mögliche Transformation mittels LA-ICP-MS.

AP2: Die Einreichung des internationalen Manuskripts der thermodynamischen Simulationsrechnungen verzögerte sich weiterhin und ist nun für die erste Jahreshälfte 2022 geplant.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Montoya, V., Noseck, U., Mattick, F., Britz, S., Blechschmidt, I., and Schäfer, T. (2022): Radionuclide geochemistry evolution in the Long-term In-situ Test (LIT) at Grimsel Test Site (Switzerland). *Journal of Hazardous Materials* 424, 127733

Huber, F.M., Leone, D., Trumm, M., Moreno, L.R., Neretnieks, I., Wenka, A., and Schäfer, T. (2021): Impact of rock fracture geometry on geotechnical barrier integrity – A numerical study. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences* 142, 104742

Bouby, M., Kraft, S., Kuschel, S., Geyer, F., Moisei-Rabung, S., Schäfer, T., and Geckeis, H. (2020): Erosion dynamics of compacted raw or homoionic MX80 bentonite in a low ionic strength synthetic water under quasi-stagnant flow conditions. *Applied Clay Science* 198, 105797

Zuwendungsempfänger: Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Hermann-von-Helmholtz-Platz 1, 76344 Eggenstein-Leopoldshafen		Förderkennzeichen: 02 E 11759B
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Grimsel Felslabor: In-situ-Experimente zur Bentonit Langzeit-Stabilität und der Radionuklidmobilität an der Grenzfläche Bentonit - Kristallin (KOLLORADO-e3), Teilprojekt B		
Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte, Feld: 2.3		
Laufzeit des Vorhabens: 01.05.2019 bis 31.12.2022	Berichtszeitraum: 01.07.2021 bis 31.12.2021	
Gesamtkosten des Vorhabens: 371.183,00 EUR	Projektleiter: Dr. Marquardt	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Hauptziel des Vorhabens ist es, das mechanistische Verständnis der Prozesse weiter zu vertiefen, die unter naturnahen, endlagerrelevanten Bedingungen in geklüfteten Granitsystemen die Integrität der Bentonitbarriere beeinträchtigen und zu einem kolloidgetragenen Radionuklid (RN)-Transport führen können. Dies umfasst die grundlegenden Mechanismen der Bentoniterosion und Kolloidbildung am Übergang des Bentonit-Versatzes/Puffers zum Kristallingestein, die RN-Speziation, insbesondere die Wechselwirkungen zwischen RNs und Kolloiden sowie die Wechselwirkungen von gelösten RN und/oder Kolloiden mit den Gesteinsoberflächen. Die geplanten Arbeiten bauen auf den in Kollorado-e2 erzielten Erkenntnissen auf.

Das experimentelle Programm im Labor und im Untertagelabor Grimsel unter Anwendung von spektroskopischen und mikroskopischen Methoden der Partner FSU und KIT-INE soll dazu beitragen, ein verbessertes mechanistisches Verständnis der Integrität der Bentonitbarriere und des kolloidgetragenen RN-Transports zu erreichen. Es soll die Übertragbarkeit der Labordaten auf natürliche Systeme überprüft und Eingangsdaten für die in der Langzeitsicherheitsanalyse von GRS verwendeten Codes CLAYPOS, COFRAME und d^{3f++} ermittelt werden. Diese Codes sowie von KIT-INE und FSU genutzte gekoppelte reaktive Transportmodelle werden zur Beschreibung der Feldexperimente weiterentwickelt, angewandt und damit weiter qualifiziert.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Experimentelles Programm zum kolloidgetragenen RN-Transport (KIT, FSU)
 - AP1.1: Radionuklidtransport in kompaktiertem Bentonit
 - AP1.2: Integrität der Bentonitbarriere
 - AP1.3: Kolloidgetragener Radionuklidtransport
- AP2: Modellrechnungen zum kolloidgetragenen RN-Transport (GRS, KIT, FSU)
 - AP2.1: Benchmarkrechnungen zu thermodynamischen Daten (GRS, KIT, FSU)
 - AP2.2: Simulationsrechnungen für das CFM Experiment LIT und Mock-Up Tests (GRS)
 - AP2.3: Simulationsrechnungen für bisherige und weitere CFM Feldexperimente (GRS)
 - AP2.4: Modellrechnungen/Bewertung des kolloidgetragenen RN Transports (GRS)
- AP3: Integration der Ergebnisse und Abschlussdokumentation (GRS, KIT, FSU)

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

LIT-Mock-up-Experimente

Aus dem im INE aufgebauten aktiven Mock-up-Test, der mit Radionuklidtracer gefüllte Ampullen enthält, wurde ein Bentonitstück von ca. 3 cm x 2 cm x 1.5 cm entnommen und in einer PFA-Flasche mit Acrylharz (Epofix-Harz) eingebettet. Von dem so vorbehandelten Probenstück, das eine zerbrochene Radiotracerampulle enthält, wurden mit SiC-Schleifpapier Bentonitschichten von 30 bis 100 µm abgeschliffen. Hierbei wurden große Anstrengungen unternommen, um Kontaminationen und Querkontaminationen in unterschiedlichen Proben zu verhindern. Danach erfolgte die Desorption der Radionuklide vom Bentonit mit 4 M HNO₃. Einige ausgewählten Proben werden zudem einem Totalaufschluss mit HF/HNO₃ unterzogen, um zu überprüfen, ob die Radionukliddesorption vollständig ist. Die Konzentrationen von ²³³U, ²³⁷Np, ²⁴²Pu, ²⁴¹Am und ⁹⁹Tc werden anschließend mittels (SF) ICP-MS bestimmt, um Diffusionsprofile der Radionuklide zu erhalten. Weitere direkte Analysen der festen Probe sind mittels LA ICP-MS geplant.

4. Geplante Weiterarbeiten

In-situ-LIT „post-mortem“ Analysen

Nach erheblichen durch technische Schwierigkeiten und Corona Einschränkungen bedingten zeitlichen Verzögerungen wurden nun In-situ-LIT-Proben aus dem Grimsel Felslabor, die ebenfalls Ampullen mit Radionuklid-Tracer-Cocktail enthalten, im Dezember 2021 vor Ort geschnitten und können nun im Februar 2022 zum INE geliefert werden. Die In-situ-LIT-Proben werden dann einer ähnlichen Probenvorbereitung wie die Mock-up-Test Proben unterzogen, um Diffusionsprofile zu bestimmen. Als Analysemethoden kommen die Autoradiographie, die (SF) ICP-MS sowie die LA ICP-MS zum Einsatz.

Weitere Untersuchungen sind an Proben von der Grenzfläche Bentonit/Kohlenstoffstahl geplant. Ziel entsprechender Analysen ist die Identifizierung und Quantifizierung von Korrosions- und Sekundärphasen, die sich während der Dauer des In-situ-Experiments im Untertagelabor gebildet haben. An einigen ausgewählten Proben sollen dazu µXRF- und µXANES-Analysen durchgeführt werden, um die Speziation von Fe an der Grenzfläche Bentonit/Kohlenstoffstahl sowie die chemische Natur von Korrosionsprodukten genauer zu untersuchen. Zudem sollen SEM-EDX sowie (SF) ICP-MS Analysen dazu verwendet werden, um Elementverteilungen als Folge von Korrosionsvorgängen (z. B. Fe) aber auch um eine Ausbreitung der dem Tracercocktail bzw. den eingebrachten Bentonitringen zugemischten Zn- oder Ni-markierter Montmorillonit-Partikeln zu untersuchen.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Aus den AMS Ergebnissen der Analysen der Grundwasserproben aus dem In-situ-LIT-Experiment ist eine entsprechende Publikation in Vorbereitung.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 11759C
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Grimsel Felslabor: In-situ-Experimente zur Bentonit Langzeit-Stabilität und der Radionuklidmobilität an der Grenzfläche Bentonit - Kristallin (KOLLORADO-e3), Teilprojekt C		
Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte, Feld: 2.3		
Laufzeit des Vorhabens: 01.05.2019 bis 31.12.2022	Berichtszeitraum: 01.07.2021 bis 31.12.2021	
Gesamtkosten des Vorhabens: 316.420,00 EUR	Projektleiter: Dr. Noseck	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Hauptziel des Vorhabens ist es, das mechanistische Verständnis der Prozesse weiter zu vertiefen, die unter naturnahen, endlagerrelevanten Bedingungen in geklüfteten Granitsystemen die Integrität der Bentonitbarriere beeinträchtigen und zu einem kolloidgetragenen Radionuklid (RN)-Transport führen können. Dies umfasst die grundlegenden Mechanismen der Bentonitrosion und Kolloidbildung am Übergang des Bentonit- Versatzes/Puffers zum Kristallgestein, die RN-Speziation, insbesondere die Wechselwirkungen zwischen RNs und Kolloiden sowie die Wechselwirkungen von gelösten RN und/oder Kolloiden mit den Gesteinsoberflächen. Die geplanten Arbeiten bauen auf den in Kolorado-e2 erzielten Erkenntnissen auf. Das experimentelle Programm im Labor und im Untertagelabor Grimsel unter Anwendung von spektroskopischen und mikroskopischen Methoden der Partner FSU und KIT-INE soll dazu beitragen, ein verbessertes mechanistisches Verständnis der Integrität der Bentonitbarriere und des kolloidgetragenen RN-Transports zu erreichen. Es soll die Übertragbarkeit der Labordaten auf natürliche Systeme überprüft und Eingangsdaten für die in der Langzeitsicherheitsanalyse von GRS verwendeten Codes CLAYPOS, COFRAME und d^3f^{++} ermittelt werden. Diese Codes sowie von KIT-INE und FSU genutzte gekoppelte reaktive Transportmodelle werden zur Beschreibung der Feldexperimente weiterentwickelt, angewandt und damit weiter qualifiziert.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Experimentelles Programm zum kolloidgetragenen RN-Transport (KIT, FSU)
 - AP1.1: Radionuklidtransport in kompaktiertem Bentonit
 - AP1.2: Integrität der Bentonitbarriere
 - AP1.3: Kolloidgetragener Radionuklidtransport
- AP2: Modellrechnungen zum kolloidgetragenen RN-Transport (GRS, KIT, FSU)
 - AP2.1: Benchmarkrechnungen zu thermodynamischen Daten (GRS, KIT, FSU)
 - AP2.2: Simulationsrechnungen für das CFM Experiment LIT und Mock-Up Tests (GRS)
 - AP2.3: Simulationsrechnungen für bisherige und weitere CFM Feldexperimente (GRS)
 - AP2.4: Modellrechnungen/Bewertung des kolloidgetragenen RN Transports (GRS)
- AP3: Integration der Ergebnisse und Abschlussdokumentation (GRS, KIT, FSU)

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP2: Veröffentlichung des ersten Papers mit den Ergebnissen der deutschen Gruppen KIT-INE und GRS. Überarbeitung des Entwurfs zu den thermodynamischen Benchmarkrechnungen mit den Partnern FSU, GRS, KIT-INE, UJV, JAERI, RWM, CIEMAT and KAERI.

Erstellung eines Modells und Durchführung von Modellrechnungen mit PHAST zu den am FSU durchgeführten Ionenaustauschexperimenten mit vorbehandelten Montmorilloniten aus MX-80-Bentonit und Mischungen mit Quarz. Ermittlung des Einflusses von Ionenaustauschprozessen auf die erwarteten Ionenkonzentrationen in Lösung und Vergleich mit den experimentell bestimmten Werten.

Vorstellung der ersten Rechenfälle und Ergebnisse zur Simulation der Laborversuche und Diskussion der Übereinstimmungen und Abweichungen mit FSU.

Weiterführung der Transportrechnungen zum kolloidgetragenen RN-Transport für ein potenzielles deutsches Endlagersystem. Durchführung von Parametervariationen zur Ermittlung deren Einflusses auf die Radionuklidströme aus der Granitformation.

AP3: Durchführung von bilateralen Arbeitsgespräche und eines Kolorado-e3 Projekttreffens zum Austausch von Ergebnissen und Koordination der Arbeiten mit den Partnern von FSU und KIT-INE. Teilnahme am virtuellen CFM Partner Meeting.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP2: Fertigstellung des Papers zu den thermodynamischen Benchmarkrechnungen mit den Partnern FSU, GRS, KIT-INE, UJV, JAERI, RWM, CIEMAT and KAERI. Einreichung bei Applied Geochemistry.

Modifikation der Geometrie für die Vorhersagerechnungen zur Radionuklid-Diffusion im Bentonit auf Basis der CT-Ergebnisse zur Lage der Kluft. Durchführung weiterer Rechnungen für die Mock-up-Experimente.

Abschluss und Dokumentation der Transportrechnungen zum kolloidgetragenen RN-Transport für ein potenzielles deutsches Endlagersystem und Ableitung von Aussagen zur Bedeutung des kolloidgetragenen Radionuklidtransports für die Langzeitsicherheit eines Endlagers im Kristallingestein.

Weiterführung der Modellrechnungen mit PHAST zu den am FSU durchgeführten Ionenaustauschexperimenten mit vorbehandelten Montmorilloniten aus MX-80 und FEBEX-Bentonit und Mischungen mit Quarz und Ca-haltigen Mineralen (Gips oder Calcit). Ermittlung des Einflusses der Gipsauflösung auf die erwarteten Ionenkonzentrationen in Lösung und Vergleich mit den experimentell bestimmten Werten. Diskussion und Austausch mit den Experimentatoren am FSU.

AP3: Durchführung weiterer bilateraler Arbeitsgespräche und von Kolorado-e3 Projekttreffens zum Austausch von Ergebnissen und Koordination der Arbeiten mit den Partnern von FSU und KIT-INE.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Montoya, V., Noseck, U., Mattick, F., Britz, S., Blechschmidt, I., Schäfer, Th.: Radionuclide geochemistry evolution in the Long-term In-situ-Test (LIT) at Grimsel Test Site (Switzerland). *Journal of Hazardous Materials* 424 (2022) 127733

Zuwendungsempfänger: Technische Universität Bergakademie Freiberg, Akademiestr. 6, 09599 Freiberg		Förderkennzeichen: 02 E 11769A
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: MgO-Spritzbeton für Streckenverschlüsse für HAW-Endlager im Steinsalz (MgO-S3), Teilprojekt A		
Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte, Feld: 2.3		
Laufzeit des Vorhabens: 01.05.2019 bis 31.03.2022	Berichtszeitraum: 01.07.2021 bis 31.12.2021	
Gesamtkosten des Vorhabens: 1.518.723,00 EUR	Projektleiter: Dr. Gruner	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Der MgO-Beton D4 ist in zukünftigen HAW-Endlagern als Widerlagermaterial mit Abdichtfunktion für Schachtverschlüsse (in Ortbeton) und für Streckenverschlüsse (in Spritzbeton) sowohl im Steinsalz als auch im Anhydrit potentiell einsetzbar. Das Vorhaben MgO-S3 schafft wissenschaftliche und technische Voraussetzungen für die Konzeption und den Bau von Streckenverschlussbauwerken aus MgO-Spritzbeton, die für eine genehmigungsfähige Errichtung zukünftiger Streckenverschlussbauwerke aus MgO-Spritzbeton in zukünftigen HAW-Endlagern im Steinsalz genutzt werden können. Dazu soll die Datenbasis für MgO-Spritzbetonbauwerke im Steinsalz vervollständigt werden.

Die Bearbeitung des Vorhabens erfolgt gemeinsam mit dem Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf (HZDR) als Verbundpartner und mit der Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung (BAM) als Partner auf Basis einer Zusammenarbeitserklärung.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Selektiver Rückbau des Funktionsbauwerkes GV2.
- AP2: Untersuchungen zur möglichen Variation der Spritzbetonrezeptur im Hinblick auf die technologische Verarbeitbarkeit.
- AP3: Laboruntersuchungen zur Vervollständigung der Datenbasis für MgO-Spritzbeton.
- AP4: Synthese/Wissenschaftliches Programm für ein In-situ-Verschlussbauwerk aus MgO-Spritzbeton im Steinsalz.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP1: In der radial gestoßenen Bohrungen B45 im Bauwerk GV2 wurde die Lösungspermeabilität über eine Länge von 0,4 m bis 2,36 m bei drei Druckstufen (3,8 bar, 4,8 bar und 8 bar) gemessen. Die durch Lösungskontakt bewirkte Verringerung der integralen Permeabilität von $1,7 \cdot 10^{-17} \text{ m}^2$ (Gaspermeabilität) auf $< 10^{-22} \text{ m}^2$ (Lösungspermeabilität) ist ein weiteres Beispiel für die bereits gezeigte aktive Selbstabdichtung des MgO-Spritzbetons bei Lösungskontakt.
- AP2: Der In-situ-Spritzversuch GSBV4 wurde erfolgreich durchgeführt. Durch weitere technische Anpassungen konnte im Vergleich zum vorangegangenen Versuch GSBV3 die Gleichmäßigkeit und die Qualität des Spritzbetons verbessert werden. An 32 Kernproben wurden Nachuntersuchungen durchgeführt. Es wurden 6 Proben für direkte Scherversuche und 6 Proben für direkte Zugversuche (IfG-Leipzig) hergestellt. Durch die BAM wurden in einem Messfeld Ultraschalluntersuchungen durchgeführt. Weiterhin wurde in 2 Bohrungen die In-situ-Gaspermeabilität gemessen. Sie lag abschnittsweise zwischen $5 \cdot 10^{-15} \text{ m}^2$ und $3 \cdot 10^{-18} \text{ m}^2$. Anschließend wurden die Bohrungen mit Lösung gefüllt, um die In-situ-Lösungspermeabilität zu messen.
- AP3: An 3 Tage alten Bohrkernen aus dem In-situ-Spritzversuch GSBV4 (MgO-Spritzbeton mit Steinsalzzuschlag) wurde bereits eine mittlere einaxiale Druckfestigkeit von 41,4 MPa erreicht, die nach 28 Tagen auf 52,3 MPa anstieg. Dies ist höher als beim vergleichbaren Versuch GSBV3 (Steinsalzzuschlag) und sogar höher als bei den Versuchen mit Hartgesteinszuschlag (GSBV1 und GSBV2).
- AP4: Durch kalorimetrische Messungen wurden für das eingesetzte MgO und die jetzt verwendeten Rezepturvarianten die Ausgangsparameter für die zukünftigen thermo-mechanischen Berechnungen für die Ermittlung der optimalen Schichtmächtigkeit bestimmt. Dazu wurde die Modellgeometrie abgestimmt, wobei als Modell ein MgO-Spritzbeton-Streckenverschlusses mit Instrumentierung zugrunde gelegt wurde.

4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1: Die Arbeiten sind abgeschlossen.
- AP2: Die Arbeiten sind abgeschlossen. Die Ergebnisse der In-situ-Lösungspermeabilität stehen noch aus.
- AP3: Abschluss der Untersuchungen der Lösungspermeabilität an Bohrkernen aus dem Spritzversuch GSBV4.
- AP4: Abschluss der Modellrechnungen beim IfG Leipzig. Arbeiten zum Abschlussbericht.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e. V., Bautzner Landstr. 400, 01328 Dresden		Förderkennzeichen: 02 E 11769B
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: MgO-Spritzbeton für Streckenverschlüsse für HAW-Endlager im Steinsalz (MgO-S3), Teilprojekt B		
Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte, Feld: 2.3		
Laufzeit des Vorhabens: 01.05.2019 bis 31.07.2022	Berichtszeitraum: 01.07.2021 bis 31.12.2021	
Gesamtkosten des Vorhabens: 168.309,00 EUR	Projektleiter: Dr. Kulenkampff	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Der MgO-Beton D4 ist in zukünftigen HAW-Endlagern als Widerlagermaterial mit Abdichtfunktion für Schachtverschlüsse (in Ortbeton) und für Streckenverschlüsse (in Spritzbeton) sowohl im Steinsalz als auch im Anhydrit potentiell einsetzbar. Das Vorhaben MgO-S3 schafft wissenschaftliche und technische Voraussetzungen für die Konzeption und den Bau von Streckenverschlussbauwerken aus MgO-Spritzbeton, die für eine genehmigungsfähige Errichtung zukünftiger Streckenverschlussbauwerke aus MgO-Spritzbeton in zukünftigen HAW-Endlagern im Steinsalz genutzt werden können. Dazu soll die Datenbasis für MgO-Spritzbetonbauwerke im Steinsalz vervollständigt werden.

Die Bearbeitung des Vorhabens erfolgt gemeinsam mit der TU Bergakademie Freiberg (TU-BAF) als Koordinator und mit der Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung (BAM) als Partner auf Basis einer Zusammenarbeitserklärung.

Das Teilprojekt des HZDR soll Fragen klären, die mit der Parametrisierung der Durchlässigkeit des prinzipiell inhomogenen Materials verbunden sind.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP1: Selektiver Rückbau des Funktionsbauwerkes GV2.

AP2: Untersuchungen zur möglichen Variation der Spritzbetonrezeptur im Hinblick auf die technologische Verarbeitbarkeit.

AP3: Laboruntersuchungen zur Vervollständigung der Datenbasis für MgO-Spritzbeton.

AP4: Synthese/Wissenschaftliches Programm für ein In-situ-Verschlussbauwerk aus MgO-Spritzbeton im Steinsalz.

Im Teilprojekt des HZDR werden im Rahmen der AP1 und 3 Transportuntersuchungen im Labor in Langzeit-Injektionsexperimenten mit Erfassung durch Positronen-Emissions-Tomographie (PET) und strukturelle Untersuchungen mit μ CT vorgenommen.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1/3: PET/ μ CT-Experimente an Proben aus GSBV4 – zeigen starke Saugwirkung und Gefügeveränderung durch Quellung. μ CT-Untersuchungen an weiteren Bohrkernen.

AP2: keine eigenen Arbeiten im Teilprojekt.

AP4: Quantifizierung der Porosität mit Hilfe von μ CT.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP1/3: Abschließende PET-Injektionsexperimente gemäß Absprache mit Partnern. Weitere μ CT-Experimente zur Klärung der Transportwegsamkeiten.

AP2: keine eigenen Arbeiten im Teilprojekt.

AP4: Detektion der Transportwege und Porositätsverteilung.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Bundesanstalt für Materialforschung und –prüfung (BAM), Unter den Eichen 87, 12205 Berlin		Förderkennzeichen: 02 E 11779
Vorhabensbezeichnung: MgO-Spritzbeton für Streckenverschlüsse für HAW-Endlager im Steinsalz, Qualitätssicherung mit Ultraschall (MgO-S3)		
Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte, Feld: 2.3		
Laufzeit des Vorhabens: 01.05.2019 bis 31.03.2022	Berichtszeitraum: 01.07.2021 bis 31.12.2021	
Gesamtkosten des Vorhabens: 31.864,46 EUR	Projektleiter: Dr. Niederleithinger	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Dieses Vorhaben wird in Nachfolge des Vorhabens „MgO-Spritzbeton: Verhalten bei Angriff von MgCl₂-Lösung (MgO-SEAL)“ (Förderkennzeichen: 02E11435, 01.10.2015 - 30.04.2019) und im Verbund mit „Verbundprojekt: MgO-Spritzbeton für Streckenverschlüsse für HAW-Endlager im Steinsalz (MgO-S3), Teilprojekt A“ (Förderkennzeichen: 02E11769A) durchgeführt.

Das Verbundvorhaben soll belegen, dass beim Angriff von MgCl₂-haltiger gesättigter NaCl-Lösung auf dem MgO-Spritzbeton, die Phasenumwandlung der 5-1-8-Phase in die thermodynamisch stabile 3-1-8-Phase zu einer Reduzierung der Permeabilität führt. Dazu sollen Proben aus dem MgO-Spritzbeton untersucht werden, die ausreichend lange unter Einwirkung der Lösung standen. Diese Proben sollen sowohl aus den Langzeitbohrlochversuchen im MgO-Spritzbetonbauwerk GV2 als auch durch dessen partiellen Rückbau gewonnen werden.

Das hier beschriebene Vorhaben umfasst im Wesentlichen Ultraschalluntersuchungen am Bauwerk und an Proben, deren Auswertung sowie Empfehlungen für das weitere Vorgehen und zukünftige Qualitätssicherung.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Die BAM hat Anteile in folgenden Arbeitspaketen des Verbundprojekts

AP1: Selektiver Rückbau des Funktionsbauwerkes GV2

AP1.1: Aufnahme des Ist-Zustandes des MgO-Spritzbetons

AP3: Laboruntersuchungen zur Vervollständigung der Datenbasis für MgO-Spritzbeton

AP3.7: Materialcharakterisierung durch US-Anwendungen

AP4: Synthese/Wissenschaftliches Programm für ein In-situ-Verschlussbauwerk aus MgO-Spritzbeton im Steinsalz

AP4.3: Vorschlag für die begleitende Qualitätssicherung bzw. -dokumentation

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Der MgO-Spritzbeton soll durch Ultraschall-Messungen mit folgenden Zielen charakterisiert werden:

- Bestimmung von Ultraschall-Materialparametern
- Identifikation von Fehlstellen
- Ableitung von möglichen Parametern für eine Qualitätsüberwachung

Aufgrund der noch nicht voll schlüssigen Messergebnisse an den bisher durchgeführten Modellversuchen im Bergwerk Teutschenthal wurde mit der TU BA Freiberg ein zusätzlicher Versuch vereinbart. Hierfür wurden durch die TU 12 Fehlstellen in Form von vertikalen Nuten und Fremdkörpern in einem Teilbereich eines Spritzbeton-Versuchskörpers eingebracht. Ungefähre Größe und Tiefenbereich der Anomalien wurden vorab zwischen TU und BAM besprochen, die genaue Anzahl, Position und Abmessungen der BAM aber vor Messung und Auswertung nicht mitgeteilt. Die Messungen (zusätzlich auch mit einem neuartigen, verbesserten Ultraschall-Messgerät) erfolgten durch die BAM am Standort Teutschenthal im Dezember 2021. Erste Ergebnisse wurden vor Jahresschluss an die TU übergeben.

4. Geplante Weiterarbeiten

Im Januar und Februar erfolgt eine quantitative Auswertung und Beurteilung des oben beschriebenen finalen Versuchs. Im März folgt die Berichterstellung. Das Projekt endet planmäßig am 31.3.2022.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Für die Fachtagung NDT-CE 2022 (August 2022, Zürich) wurde ein Beitrag eingereicht (mit TU BA Freiberg)

Zuwendungsempfänger: Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Kaiserstr. 12, 76131 Karlsruhe		Förderkennzeichen: 02 E 11799A
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Vertikales hydraulisches Dichtsystem nach dem Sandwich-Prinzip - Hauptprojekt (SANDWICH-HP), Teilprojekt A		
Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte, Feld: 2.3		
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2019 bis 30.06.2023	Berichtszeitraum: 01.07.2021 bis 31.12.2021	
Gesamtkosten des Vorhabens: 2.876.223,90 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Emmerich	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Im Sandwich-Hauptprojekt wird im Felslabor Mont Terri (CH) ein großmaßstäbliches In-situ-Experiment zu einem vertikalen hydraulischen Verschlussystem nach dem Sandwich-Prinzip umgesetzt. Die umfangreiche Vorplanung dazu wurde im Sandwich-Vorprojekt (02 E 11587A, 02 E 11587B) durchgeführt. Ebenso wie das Vorprojekt ist Sandwich-HP ein Verbundprojekt von GRS und KIT mit Beteiligung der internationalen Partner BGR, Swisstopo, Enresa, NWMO, RWM und ENSI. Die Projektleitung liegt bei der GRS.

Das von KIT entwickelte Sandwich-System besteht aus Wechsellagen von Bentonit-Dichtsegmenten (DS) und hydraulisch leitenden Potentialausgleichsschichten (Äquipotenzialsegmente – ES). Im Sandwich-HP werden solche Dichtsystem in zwei vertikalen Experimentalschächten von 1.2 m Durchmesser und 12 m bzw. 10 m Tiefe eingebaut. Die Dichtsysteme werden über Druckkammern im Schachttiefsten mit synthetischem Opalinuston-Porenwasser aufgesättigt, das jeweils über geeignete Zuleitungsbohrlöcher zugeführt wird. Die Schächte und das umgebende Gebirge werden zur Überwachung des Gesamtsystems intensiv instrumentiert. Die Versuchsziele umfassen die Demonstration der Einbautechnik, die Untersuchung des Aufsättigungsprozesses, die Qualifizierung der Mess- und Überwachungstechnik, die Bewertung der Wirksamkeit des Sandwich-Verschlussystems.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Finalisierung Testplan
- AP2: Instrumentierung Opalinuston und Probennahme Opalinuston
- AP3: Erstellung Experimentalschächte und Charakterisierung EDZ
- AP4: Installation Sandwichverschluss und Instrumentierung einschließlich EDZ
- AP5: Betrieb, Monitoring, Datenvalidierung, Auswertung und Interpretation
- AP6: Laboruntersuchungen und Materialparametrisierung
- AP7: Assessment und Modellierung
- AP8: Dokumentation und Berichtswesen

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP2: Siehe Projektstatusbericht der GRS zu 02 E 11799B.
- AP4: Im Juli wurden zwei Sensorkabel (je ein p und T Sensor in der Druckkammer) nach Austritt von Fluid oberhalb des Schachtverschlusses abgedichtet und gekappt. Nach erneuten Fluidaustritten aus Sensorkabeln wurden in der zweiten Novemberwoche alle ERT- und die verbliebenen Drucksensorkabel oberhalb des Schachtverschlusses abgedichtet. Außer dem zweiten Drucksensor in der Druckkammer sind alle Drucksensoren sowie die ERT-sensoren weiterhin funktionsfähig. Es wurde ein Berstdruck der Sensorkabel ≥ 24 bar ermittelt. Die an der Schachtwand installierten StabTDRsensoren liefern momentan keine zuverlässigen Daten. Die Ursache wird ermittelt.
- AP5: Siehe Projektstatusbericht der GRS zu 02 E 11799B.
Die installierten vertikalen und horizontalen TDR TAUPE Sensoren bestätigen die Funktionalität und zeigten einen stabilen Zustand des Sandwichverschlusses.
- AP6: Mineralogisch/chemische Analysen (KAK, austauschbare Kationen sowie Ionentransport) der Ausbauproben des HTV-6/HTV-7 wurden fortgesetzt.
Der HTV-8 wurde verläuft planmäßig. siehe Projektstatusbericht TUBAF zu 02 E 11799C. Die Minisandwichversuche Oe11 & Oe12 wurden fortgesetzt. Bei den Versuchen Oe13 & Oe14 wurde noch kein Fluiddurchbruch beobachtet. Quelldruckversuche mit Secursol MHP1 und Pearson Wasser A3 wurden abgeschlossen und Quelldruck-Sättigungskurven abgeleitet. Zudem wurden neue Quelldruckzellen in Betrieb genommen, um Quelldruck-Sättigungskurven für Calcigel zu bestimmen. Die Saugspannungskurve für Secursol MHP1 wurde ermittelt.
- AP7: Siehe Projektstatusbericht des GRS zu 02 E 11799B.
- AP8: Laufende Erstellung von sowie Beteiligung an Publikationen und Präsentationen von Ergebnissen.

4. Geplante Weiterarbeiten

- AP4: Planung des Dichtsystemaufbaus und Instrumentierung, Erarbeitung Testplan Schacht 2 (1. HJ 2022); Einbau Sandwichverschlusssystem Schacht 2
- AP5: Fortsetzung Aufsättigung und Monitoring Sandwichverschlusssystem Schacht 1
- AP6: Fortsetzung MiniSandwichversuche und Quelldruckmessungen; Rückbau HTV-8 (1. HJ 2022) und Charakterisierung der Ausbauproben (2. HJ 2022); Vorbereitung und Einbau HTV-9
- AP7: Evaluierung und Bereitstellung Labordaten zur Parametrisierung der ES und DS Materialien
- AP8: Bericht zu HTV-8 gemeinsam mit TUBAF; Vorbereitung weiterer Veröffentlichungen

5. Berichte, Veröffentlichungen

- Emmerich et al. (2021): A MiniSandwich Experiment with Blended Ca-Bentonite and Pearson Water – Hydration, Swelling, Solute Transport and Cation Exchange, *Minerals*, 11, 1061. <https://doi.org/10.3390/min11101061>)
- Bakker et al. (2021): Impact of bentonite soluble phases in hydraulic Sandwich sealing systems on ion transport and cation exchange at semi-technical scale (HTV-2 and HTV-3), oral presentation at 3rd European Mineralogical Conference, Cracow, Poland, September 2021

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 11799B	
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Vertikales hydraulisches Dichtsystem nach dem Sandwich-Prinzip - Hauptprojekt (SANDWICH-HP), Teilprojekt B			
Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte, Feld: 2.3			
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2019 bis 30.06.2023		Berichtszeitraum: 01.07.2021 bis 31.12.2021	
Gesamtkosten des Vorhabens: 1.453.730,00 EUR		Projektleiter: Wieczorek	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Im Sandwich-Hauptprojekt wird im Felslabor Mont Terri (CH) ein großmaßstäbliches In-situ-Experiment zu einem vertikalen hydraulischen Verschlussystem nach dem Sandwich-Prinzip umgesetzt. Die umfangreiche Vorplanung dazu wurde im Sandwich-Vorprojekt (02 E 11587A und 02 E 11587B) durchgeführt. Ebenso wie das Vorprojekt ist Sandwich-HP ein Verbundprojekt von GRS und KIT mit Beteiligung der internationalen Partner BGR, Swisstopo, Enresa, NWMO, RWM und ENSI. Die Projektleitung liegt bei der GRS.

Das von KIT entwickelte Sandwich-System besteht aus Wechsellagen von Bentonit-Dichtsegmenten (DS) und hydraulisch leitenden Potentialausgleichsschichten (Äquipotenzialsegmente – ES). Im Sandwich-HP werden solche Dichtsystem in zwei vertikalen Experimentalschächten von 1.2 m Durchmesser und 12 m bzw. 10 m Tiefe eingebaut. Die Dichtsysteme werden über Druckkammern im Schachttiefsten mit synthetischem Opalinuston-Porenwasser aufgesättigt, das jeweils über geeignete Zuleitungsbohrlöcher zugeführt wird. Die Schächte und das umgebende Gebirge werden zur Überwachung des Gesamtsystems intensiv instrumentiert. Die Versuchsziele umfassen die Demonstration der Einbautechnik, die Untersuchung des Aufsättigungsprozesses, die Qualifizierung der Mess- und Überwachungstechnik, die Bewertung der Wirksamkeit des Sandwich-Verschlussystems.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Finalisierung Testplan
- AP2: Instrumentierung Opalinuston und Probennahme Opalinuston
- AP3: Erstellung Experimentalschächte und Charakterisierung EDZ
- AP4: Installation Sandwichverschluss und Instrumentierung einschließlich EDZ
- AP5: Betrieb, Monitoring, Datenvalidierung, Auswertung und Interpretation
- AP6: Laboruntersuchungen und Materialparametrisierung
- AP7: Assessment und Modellierung
- AP8: Dokumentation und Berichtswesen

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP1: Beendet.
- AP2: Die begonnene Aufsättigung des Dichtsystems in Schacht 1 (siehe AP5) führt zu einem allmählichen Porendruckanstieg bei den Messstellen im Nahbereich von Schacht 1 auf der Höhe des untersten Dichtelements. Auch bei den Spannungssensoren wird eine mechanische Reaktion auf die Druckbeaufschlagung der Injektionskammer beobachtet. Der vorübergehende Durchbruch nach ES2 (siehe AP5) wurde als Druckwelle von den drei Sensoren registriert, bei denen die Leitungen im Zuge der Schachtabteufung durchtrennt wurden.
- AP3: Beendet.
- AP4: Siehe Projektstatusbericht des KIT zu 02 E 11799A.
- AP5: Nach der Abdichtung zweier im Juni aufgetretener Kabellecks wurde die Aufsättigung des Dichtsystems in Schacht 1 am 7.7.2021 fortgesetzt. Nach einer Erhöhung des Injektionsdrucks von 5 bar auf 8 bar am 11.08.2021 traten schlagartig 17 l Wasser in das System ein – unter Verlust des Injektionsdrucks, da sich die Gasflasche zur Druckbeaufschlagung entleerte. Die Reaktionen der Sensoren (Wassergehalt, Druck, relative Feuchte) zeigten einheitlich, dass das Wasser (vermutlich an der Kontur) das erste Dichtelement (DS1) durchbrach und das zweite Äquipotentialsegment (ES2) erreichte. Anschließend wurde das nach ES2 durchgebrochene Wasser von den benachbarten Dichtsegmenten aufgenommen, was die Funktionalität des Systems bestätigt. Allerdings wurden im Verlauf dieses Ereignisses wiederum Kabellecks bei den jetzt erreichten ERT- und Drucksensoren festgestellt. Vor der Fortsetzung der Aufsättigung wurden daher alle ERT- und Drucksensorkabel zusätzlich abgedichtet. Danach wurde der Injektionsdruck in kleinen Schritten erhöht und liegt jetzt (06.01.2022) bei 7.2 bar.
- AP6: Siehe Projektstatusbericht des KIT zu 02 E 11799A.
- AP7: Zur Kalibrierung der Modelle zur Beschreibung des Bentonits wurden mehrere Quelldruckversuche der IBeWa zur Modellierung durch die Teams (GRS, BGR, ENSI) ausgewählt.
- AP8: Bei der „SafeND“ Konferenz des BASE im November 2021 wurde das Projekt in einem Vortrag präsentiert. Bei der auf März 2022 verschobenen DAEF-Konferenz „3rd Conference on Key Topics in Deep Geological Disposal“ wird ein Poster präsentiert. Für die internationale „Clay Conference“ in Nancy im Juni 2022 wurden insgesamt fünf Abstracts mit Bezug auf das Projekt eingereicht. Der erste Datenbericht und der „As-built Report“ für Schacht 1 werden zurzeit bearbeitet.

4. Geplante Weiterarbeiten

- AP2: Installation fünf weiterer Minipiezometer nahe Schacht 2 (Frühjahr 2022)
- AP4: Planung von Dichtsystem und Instrumentierung für Schacht 2 (ab Januar 2022)
- AP5: Weiterführung der Aufsättigung des Verschlusssystems in Schacht 1
- AP7: Fortsetzung der Modellkalibrierung und der hydraulisch-mechanischen Simulationen

5. Berichte, Veröffentlichungen

Wieczorek, K., Emmerich, K., Schuhmann, R., Hesser, J., Furche, M., Jaeggi, D., Schefer, S., Aurich, J., Mayor, J.C., Norris, S., Birch, K., Sentis, M., García-Siñeriz, J.L., Königer, F., Glaubach, U., Rölke, C., Diedel, R., (2021): Large-scale testing of a Sandwich shaft sealing system at the Mont Terri rock laboratory. Conference Abstract, Saf. Nucl. Waste Disposal, 1, 133–135, 2021. <https://doi.org/10.5194/sand-1-133-2021>

Zuwendungsempfänger: Technische Universität Bergakademie Freiberg, Akademiestr. 6, 09599 Freiberg		Förderkennzeichen: 02 E 11799C
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Vertikales hydraulisches Dichtsystem nach dem Sandwich-Prinzip - Hauptprojekt (SANDWICH-HP), Teilprojekt C		
Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte, Feld: 2.3		
Laufzeit des Vorhabens: 01.09.2020 bis 31.08.2022	Berichtszeitraum: 01.07.2021 bis 31.12.2021	
Gesamtkosten des Vorhabens: 199.115,00 EUR	Projektleiter: Dr. Gruner	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Im Sandwich-Hauptprojekt wird im Felslabor Mont Terri (CH) ein großmaßstäbliches In-situ-Experiment zu einem vertikalen hydraulischen Verschlussystem nach dem Sandwich-Prinzip umgesetzt. Die umfangreiche Vorplanung dazu wurde im Sandwich-Vorprojekt (02 E 11587A und 02 E 11587B) durchgeführt. Ebenso wie das Vorprojekt ist Sandwich-HP ein Verbundprojekt von GRS, KIT und TUBAF mit Beteiligung der internationalen Partner BGR, Swisstopo, Enresa, NWMO, RWM, ENSI. Die Projektleitung liegt bei der GRS.

Das von KIT entwickelte Sandwich-System besteht aus Wechsellagen von Bentonit-Dichtsegmenten (DS) und hydraulisch leitenden Potentialausgleichsschichten (Äquipotenzialsegmente – ES). Im Sandwich-HP werden solche Dichtsysteme in zwei vertikalen Experimentalschächten von 1,18 m Durchmesser und knapp 12 m bzw. 10 m Tiefe eingebaut. Die Dichtsysteme werden über Druckkammern im Schachttiefsten mit synthetischem Opalinuston-Porenwasser aufgesättigt, das jeweils über geneigte Zuleitungsbohrlöcher zugeführt wird. Die Schächte und das umgebende Gebirge werden zur Überwachung des Gesamtsystems intensiv instrumentiert. Die Versuchsziele umfassen die Demonstration der Einbautechnik, die Untersuchung des Aufsättigungsprozesses, die Qualifizierung der Mess- und Überwachungstechnik sowie die Bewertung der Wirksamkeit des Sandwich-Verschlussystems.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Finalisierung Testplan
- AP2: Instrumentierung Opalinuston und Probennahme Opalinuston
- AP3: Erstellung Experimentalschächte und Charakterisierung EDZ
- AP4: Installation Sandwichverschluss und Instrumentierung einschließlich EDZ
- AP5: Betrieb, Monitoring, Datenvalidierung, Auswertung und Interpretation
- AP6: Laboruntersuchungen und Materialparametrisierung
- AP7: Assessment und Modellierung
- AP8: Dokumentation und Berichtswesen

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Das Teilvorhaben der TU Bergakademie Freiberg bezieht sich auf die Arbeitspakete AP4, AP6 und AP8 des Verbundvorhabens.

AP5: Mitarbeit an der Auswertung des Verlaufs des In-situ-Versuches 1 in Mont Terri.

AP6: Der halbtechnische Versuch HTV-8 verläuft planmäßig. Ende Dezember lag der Flüssigkeitsdruck bei konstant 75 bar. Während der konstanten Druckstufen verringert sich der eingehende Volumenstrom mit der Zeit.

Bis zu einer Flüssigkeitsdruckbelastung von ca. 35 bar hat sich der eingehende Volumenstrom mit zunehmenden Flüssigkeitsdruck auch verringert. Bei höherer Flüssigkeitsdruckbelastung (> 40 bar) wurde eine leichte Erhöhung des eingehenden Volumensstromes beobachtet. Er ist aber auch bei 75 bar immer noch < 0,01 Liter/h.

AP8: Die Messsignale des Versuches HTV-8 werden laufend ausgewertet und die Ergebnisse an die Projektpartner übergeben.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP5: Fortsetzung der Auswertung des In-situ-Versuches 1 in Mont Terri.

AP6: Abschluss der Flüssigkeitsdruckbelastung und Ausbau des halbtechnischen Versuches HTV-8.

Kontrolle und Wartung der Versuchseinrichtungen.

Vorbereitung und Einbau des Versuches HTV-9.

AP8: Bericht zur Auswertung des halbtechnischen Versuches HTV-8.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 11809A	
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Weiterentwicklung von d ³ f ⁺⁺ : Hydrogeologische Modellierung im regionalen Maßstab (HYMNE), Teilprojekt A			
Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit Bereich C3: Sicherheitsnachweis, Feld: 3.3			
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2019 bis 31.12.2022		Berichtszeitraum: 01.07.2021 bis 31.12.2021	
Gesamtkosten des Vorhabens: 1.175.210,00 EUR		Projektleiter: Schneider	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Mit d³f⁺⁺ steht ein Werkzeug zur Modellierung der thermohalinen Grundwasserströmung und des Radionuklidtransportes durch poröse und geklüftete Medien zur Verfügung, das seit 1995 im Rahmen der BMWi-geförderten Vorhaben GRUPRO, TRAPRO, E-DuR, A-DuR, H-DuR und GRUSS entwickelt wurde. Derzeit wird es im Rahmen der Projekte SUSE, SMILE, ANSICHT-II und go-CAM auf endlagerrelevante und weitere Fragestellungen angewendet. Ziel von HYMNE sind die Erweiterung und Verbesserung der Anwendbarkeit von d³f⁺⁺ auf Modelle mit freier Grundwasseroberfläche im Sedimentgestein und im Kristallin und eine Erhöhung der Prognosesicherheit. Teilziele sind die Erweiterung auf die Simulation der Grundwasserbewegung unter Permafrostbedingungen, eine Automatisierung der Modellkalibrierung, numerische Verbesserungen sowie Test und Anwendung des Codes. Die Bearbeitung erfolgt in Kooperation mit der Universität Frankfurt.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

- AP1: Erweiterung der Anwendbarkeit
- AP1.1: Kalibrierung (Anforderungen, begleitende Arbeiten)
- AP1.2: Kopplung mit Vorflutern (Konzept)
- AP1.4: Technische Verbesserungen (Konzepte)
- AP2: Grundwasserbewegung unter Permafrostbedingungen (Konzepte)
- AP4: Anwendungsrechnungen
- AP4.1: Äspö site descriptive model (SDM)
- AP4.2: Kraví Hora
- AP4.3: INTERFROST
- AP5: Wartung des Codes (Unterauftrag)
- AP6: Projektleitung und Dokumentation

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP1.1: Das Kalibrierungswerkzeug wurde auf ein weiteres Beispiel erfolgreich angewendet.
- AP1.2: Das Vorflutermodell wurde weiter vervollkommen. Verzweigungen und Einflüsse der Modellgeometrie werden durch einen Masterstudenten am G-CSC eingearbeitet.
- AP1.3: Die Implementierung eines Phasenfeldmodells als Voraussetzung für diese Arbeit ist am G-CSC sehr weit fortgeschritten.
- AP1.4: Die Verknüpfung detaillierter Modelle mit gröber strukturierten Regionalmodellen ist in Arbeit.
- AP2: Vereinfachte problemspezifische Erhaltungsgleichungen für spezielle Anwendungen wurden aus den allgemeinen Gleichungen abgeleitet. Ein Vergleich mit Ansätzen aus der Literatur wurde durchgeführt. Das mit dem COMSOL-Update im Dezember veröffentlichte Modell für den INTERFROST Benchmarkfall TH2 wurde in die Vergleiche aufgenommen, aber noch nicht abgeschlossen.
- AP4.1: Ein neuer Ansatz zur Behandlung der Deformationszonen wurde gewählt. Dafür wurden die dreidimensionalen Deformationszonen zu flächigen Objekten vereinfacht und miteinander verschnitten.
- AP4.2: Der Aufbau des Kraví Hora-Modells hat sich durch einen Bearbeiterwechsel am G-CSC verzögert. Derzeit wird der Präprozessor an die Anforderung der Einbettung eines detaillierten Modells in ein Regionalmodell angepasst (s. AP1.4).
- AP4.3: Die Modellergebnisse mit d³f++ zu den Benchmarkfällen TH2 und TH3 aus dem INTERFROST-Projekt konnten erheblich verbessert werden. Voraussichtlich sind nur noch geringere Verbesserungen notwendig.
- AP5: Ein Fehler in der Parallelisierung des ILU-Glätters, der in Verbindung mit der Levelsetmethode auftrat, wurde lokalisiert und behoben.
Das Levelsetverfahren wurde für großflächige freie Oberflächen stabilisiert.
Wegen eines Memory-Leaks stieg der Speicherbedarf während mancher Simulationen mit der Zeit stark an. Das Problem wurde analysiert und behoben.
Weiterhin wurde Unterstützung bei numerischen Problemen geleistet.
- AP6: Am 16.07. und am 03.12.2021 fanden Projektgespräche mit allen Projektpartnern als Videokonferenzen statt.

4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1.2: Die Implementierung wird fortgesetzt.
- AP1.3: Das Phasenfeldmodell wird für Kluftgestein umgesetzt.
- AP1.4: Die Verknüpfung von Modellen in ProMesh wird abgeschlossen.
- AP2: Integration von Ansätzen für die Druckabhängigkeit der thermodynamischen Zustandsgleichungen für Temperaturen unter 0 °C und Drücke bis 5 MPa. Beendigung der Modellvergleiche.
- AP4.1: Umwandlung der Deformationszonen zu niederdimensionalen Klüften. Integration der Deformationszonen in das Regionalmodell.
- AP4.2: Abschluss des Modellaufbaus und Beginn der Simulationen.
- AP4.3: Abschließende Verbesserung der Simulationsergebnisse.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Johann Wolfgang Goethe-Universität Frankfurt am Main, Theodor-W.-Adorno-Platz 1, 60323 Frankfurt am Main		Förderkennzeichen: 02 E 11809B
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Weiterentwicklung von d ^{3f++} : Hydrogeologische Modellierung im regionalen Maßstab (HYMNE), Teilprojekt B		
Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit Bereich C3: Sicherheitsnachweis, Feld: 3.3		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2019 bis 30.09.2022	Berichtszeitraum: 01.07.2021 bis 31.12.2021	
Gesamtkosten des Vorhabens: 957.067,00 EUR	Projektleiter: Lemke	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das übergeordnete Ziel des Vorhabens ist die Erweiterung und Verbesserung der Anwendbarkeit von d^{3f++} auf Modelle mit freier Grundwasseroberfläche im regionalen Maßstab im Sedimentgestein und im Kristallin sowie einer Erhöhung der Prognosesicherheit.

Teilziel 1 (abgebildet in AP1) ist die Verbesserung der Anwendbarkeit von d^{3f++} durch den Einbau einer halbautomatischen, interaktiven Modellkalibrierung, eine bessere Berücksichtigung des Vorflutereinflusses, das Ermöglichen einer freien Grundwasseroberfläche im Kluftgestein sowie einige technische Verbesserungen. Dadurch wird nicht zuletzt die Prognosesicherheit erhöht. Teilziel 2 (abgebildet in AP2) ist die Erweiterung des Anwendungsbereiches auf die Modellierung der Grundwasserströmung unter Permafrostbedingungen. Teilziel 3 (abgebildet in AP3) ist die Weiterentwicklung der Lösungsverfahren im Hinblick auf eine einfachere Nutzbarkeit. Die Verfahren bieten sehr viele Möglichkeiten. Um diese erfolgreich einzusetzen sind oft noch Experten nötig. Zur breiteren Nutzbarkeit, insbesondere in der Anwendung auf große Regionalmodelle, sollen die Robustheit der Verfahren erhöht und viele der Schritte, die bisher noch manuell durchgeführt werden, etwa in der Gitterverfeinerung, automatisiert werden. Diesem Ziel dient auch die Neustrukturierung der Software. Teilziel 4 (abgebildet in AP4) besteht in einer Erhöhung des Vertrauens in die Ergebnisse von Grundwasserströmungs- und Transportsimulationen durch die Anwendung von d^{3f++} auf endlagerrelevante Aufgabenstellungen im regionalen Maßstab.

Die Ergebnisse werden zusammen mit den Projektpartnern verwertet. Die große Nutzergemeinde des Simulationssystems UG ist eine ausgezeichnete Plattform zur Verbreitung und Verwertung der Projektergebnisse.

Es erfolgt eine Zusammenarbeit mit der Gesellschaft für Reaktorsicherheit (GRS), Braunschweig, und der Firma TechSim, Kieselbronn, als Unterauftragnehmerin der GRS.

Das Verbundprojekt ist ein Folgevorhaben der zwei BMWi-Projekte vom 01.03.2012 – 31.10.2015 (FKZ 02 E 11062) und vom 01.04.2016 – 31.07.2019 (FKZ 02 E 11476).

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Bei der Durchführung des Verbundvorhabens werden folgende Arbeitspakete vom G-CSC (Goethe-Zentrum für Wissenschaftliches Rechnen) der Universität Frankfurt bearbeitet:

AP1: Erweiterung der Anwendbarkeit (Kalibrierung, Kopplung mit Vorflutern, Zusammenspiel freie Oberfläche – Kluftgestein, technische Verbesserungen)

AP2: Grundwasserbewegung unter Permafrostbedingungen

AP3.1: Verbesserung der Robustheit der Löser durch hybride AMG-GMG Kombination

AP3.2: Softwareintegration und Neustrukturierung

AP3.3: Entwicklung und Implementierung eines voll-gekoppelten VOF-Verfahrens

AP4: Anwendungsrechnungen (Äspö site descriptive model, Kraví Hora, INTERFROST)

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1: Eine wesentliche Schwierigkeit bei der Kalibrierung ist, dass mehrere Probleme mit verschiedenen hydrogeologischen Parametern für eine ausreichend lange Modellzeit gelöst werden sollen. Um die Rechenzeiten in einem sinnvollen Bereich zu halten, müssen insbesondere lange Zeitschritte verwendet werden, bei denen die im Raum hochfrequenten Anteile der Diskretisierungsfehler der phreatischen Oberfläche

wachsen. Dies führt zu einer sehr ungenauen Abschätzung sowohl von den Positionen der freien Oberfläche in den Messpunkten, wie auch von den für die automatisierte Kalibrierung verwendeten Gradienten. Um diese hochfrequenten Anteile der Fehler zu dämpfen, wurde für die Level-Set-Verfahren eine diffusionsbasierte Stabilisierung implementiert. Der Diffusionsparameter hängt dabei von der Gitterweite und Zeitschrittlänge ab und soll möglichst klein gewählt werden, um die Konvergenz der numerischen Lösung zur analytischen Lösung zu sichern. Die numerischen Experimente haben die Effizienz dieser Vorgehensweise bestätigt. Aus dem gleichen Grund musste die Dispersion in den Transportgleichungen an der freien Oberfläche besonders betrachtet werden. Zudem musste der Code von d^3f und $ug4$ angepasst werden, damit die Rechenprogramme weiterhin lauffähig sind.

- AP2: Zur Beschreibung von Grundwasserströmungen unter Permafrostbedingungen wurde ein neues d^3f++ -Modul entwickelt. Bei den zugrundeliegenden Modellgleichungen handelt es sich um ein gekoppeltes System partieller Differentialgleichungen, welche die Massen- bzw. Energieerhaltung beschreiben. Die Modellgleichungen, welche eine allgemeinere Variante von /GRE 18/ darstellen, berücksichtigen eine Fluid- und eine Eisphase mittels zweier Sättigungsterme S_w und S_i mit $S_w+S_i=1$. Gefrier- und Auftauvorgänge werden über die sog. latente Wärme berücksichtigt, welche die im Kristallgitter des Eises enthaltene Energie beschreibt. Die Durchlässigkeit in der Fluidphase ist eine Funktion der Sättigung S_w , die Sättigung S_w wiederum eine Funktion der Temperatur T . Die Gleichungen wurden implementiert und anhand zweier Benchmarks getestet. Sowohl das Auftauen eines Eisblocks als auch die Durchströmung bzw. das Schließen eines Taliks konnten erfolgreich simuliert werden. Die Simulation erfolgte dabei mit dem LIMEX-Mehrgitterverfahren /NAE 20/. Für den Fehlerschätzer wurde mit unterschiedlichen Normen experimentiert. Die Verwendung der Temperatur erwies sich dabei für die bisherigen Zwecke als robustes Kriterium.
- AP3.1: Die Arbeiten wurden entsprechend der im Antrag angegebenen Vorgehensweise fortgesetzt.
- AP3.2: Die Arbeiten wurden entsprechend der im Antrag angegebenen Vorgehensweise fortgesetzt.
- AP3.3: Die Modellgleichungen für Dichteströmungen in d^3f++ wurden dahingehend erweitert, dass nun auch Transport in ungesättigten porösen Medien behandelt werden kann. Dazu wird zwischen der vadosen (ungesättigten) und phreatischen (gesättigten) Zone unterschieden, zwischen denen es einen kontinuierlichen Übergang gibt. Das Modell entspricht einer verallgemeinerten Richards-Gleichung, in der auch der Transport von Salz berücksichtigt wird. Dies stellt eine neuartige Beschreibung der freien Oberfläche dar, welche ein Phasenfeldmodell realisiert. Dieser einheitliche Ansatz erleichtert die Kopplung mit bestehenden und neuentwickelten Modellgleichungen. Neben der reinen Implementierung der Gleichungen mussten auch die Lösungsverfahren angepasst werden. Auch die neuen Gleichungen können mit einem angepassten LIMEX-Mehrgitterverfahren behandelt werden. In Studien wurde der Beitrag der neu hinzugekommenen Nichtlinearitäten näher untersucht. Die Erfahrungen sind dabei für ein breites Spektrum von Gesteinstypen sehr gut. Für einige Typen, wie z. B. Tongestein, lassen sich die Probleme zwar lösen, dabei schaltet die Zeitschrittweitensteuerung jedoch auf sehr kleine Zeitschrittweiten zurück. In diesem Bereich ergibt sich weiterer Forschungsbedarf. Eine Übertragung auf geklüftete Medien ist im Prinzip möglich, wurde an dieser Stelle bisher jedoch noch nicht untersucht. Außerdem wurden im Berichtszeitraum die Lösungsverfahren für die Kopplung der Vorfluter sowie für thermohaline Strömungen weiterentwickelt. Das Zusammenspiel zwischen AMG-GMG-Löser sowie dem Zeitschrittverfahren wurde dabei verbessert.
- AP4: Die Arbeit am Äspö Site Descriptive Model (SDM) Deformationszonen innerhalb des Kristallingesteins mit erhöhter Zerklüftung dreidimensional aufzulösen wurde fortgeführt. Zu diesem Zweck wurden dafür vorgesehene Meshing-Skripte mit dem Kooperationspartner GRS entwickelt, mit denen die automatisierte Rekonstruktion einzelner und die konforme Verschneidung mehrerer Deformationszonen sowie korrespondierende Volumengittergenerierung realisiert werden können.

4. Geplante Weiterarbeiten

Die Arbeiten werden entsprechend der im Antrag angegebenen Vorgehensweise fortgesetzt.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln	Förderkennzeichen: 02 E 11819
Vorhabensbezeichnung: Mineralumwandlung und Sorption bei erhöhten Temperaturen in geklüfteten Kristallingesteinen und Barrierematerial (MUSE)	
Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte, Feld: 2.3	
Laufzeit des Vorhabens: 01.08.2019 bis 31.07.2022	Berichtszeitraum: 01.07.2021 bis 31.12.2021
Gesamtkosten des Vorhabens: 1.736.012,50 EUR	Projektleiter: Dr. Flügge

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Gesetz zur Suche und Auswahl eines Standortes für ein Endlager für hochradioaktive Abfälle (Standortauswahlgesetz – StandAG) vom Juli 2013 bzw. Mai 2017 regelt das Auswahlverfahren für ein Endlager für hochradioaktive Abfälle in Deutschland. Dabei kommen grundsätzlich die Wirtsgesteine Steinsalz, Tongestein und Kristallingestein in Betracht. Im Rahmen der Forschungsvorhaben CHRISTA, KONEKD, CHRISTA-II, SUSE und UMB wurden bzw. werden einerseits verschiedene Fragestellungen bezüglich des technischen Konzepts und des Sicherheits- und Nachweiskonzepts für ein Endlager im Kristallingestein bearbeitet, und andererseits Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren als Funktion von Lösungszusammensetzung, Temperatur und mikrobieller Aktivität untersucht.

Basierend auf den genannten Arbeiten und in ihrer Fortführung soll in dem hier skizzierten Projekt MUSE (i) die Übertragbarkeit der mit der im Projekt SUSE entwickelten neuen Methode gewonnenen Sorptionsdaten überprüft und die Anwendbarkeit auf andere Kristallinstandorte durch Erhebung einer Bandbreite von Sorptionsdaten im Kristallingestein getestet werden, (ii) eine Methode zur Untersuchung des Einflusses von erhöhten Temperaturen auf Mineralumwandlungen und Gasfreisetzung in Klüftfüllungen entwickelt werden und (iii) Mechanismen der Bentonitumwandlung und Gasfreisetzung untersucht werden.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Bei der Durchführung des Vorhabens werden folgende Arbeitspakete bearbeitet:

- AP1: Übertragbarkeit der normierten Verteilungskoeffizienten zwischen verschiedenen Kristallin-Standorten
- AP2: Einfluss von erhöhten Temperaturen auf die Stabilität von Klüftfüllungen
- AP3: Einfluss von erhöhten Temperaturen auf die Stabilität von Bentoniten
- AP4: Dokumentation und Projektleitung

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP1: Übertragbarkeit der normierten Verteilungskoeffizienten:
Die Auslaugungsversuche mit der Korngrößenfraktion 1-2 mm der Kristallin-Kernproben und den synthetischen Grundwässern für das URL Bukov (Tschechien) und das URL KURT (Südkorea) wurden bei 10 °C und 80 °C begonnen und inzwischen für vier der insgesamt zehn zu untersuchenden Kernproben (Gneis-S8 vom URL Bukov und Granite-458 m, -914 m und -954 m vom URL KURT) abgeschlossen. Seit dieser Berichtsperiode laufen die Versuche unter kontrollierten CO₂-Partialdruckbedingungen in je einem mit Wippen ausgestatteten Kühl- bzw. Thermoschrank in gasdichten Flanschgefäßen. Zwecks einer erweiterten Charakterisierung der Kernproben wurden die Aufschlüsse mit der 0,1 N, 18 %igen HCl und dem Königswasser für die Korngrößenfraktion 1-2 mm aller 10 Ausgangskernproben durchgeführt.
- AP2: Einfluss von erhöhten Temperaturen auf die Stabilität von Kluffüllungen:
Hydrothermale Versuche bei 120 °C mit den fünf vor dem Pandemieausbruch erhaltenen Proben aus Russland wurden gestartet. Die Charakterisierung und Präparation der tschechischen und südkoreanischen Kernproben wurden an die TU Darmstadt vergeben.
- AP3: Einfluss von erhöhten Temperaturen auf die Stabilität von Bentoniten:
Die Versuchsreihe aus 30 Versuchen bei 120 °C mit den vom IGEM RAN an die GRS übergebenen vier Bentoniten wurde erfolgreich fortgesetzt.
- AP4: Dokumentation und Projektleitung:
Kommunikation mit IGEM RAN (Russland), SÚRAO (Tschechien) und der TU Darmstadt als Unterauftragnehmer, Ausschreibung und Vergabe des Unterauftrags.

4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1: Fortsetzung der Auslaugungsversuche. Vollaufschluss der Ausgangsproben mit der Tetrafluoroborsäure. Durchführung und Auswertung der ICP-MS-, ICP-OES-, TOC- und BET-Messungen. Durchführung von single-particle-ICP-MS-Messungen bei erwarteten Nanoteilchenfreisetzungen in den Auslaugungsversuchen.
- AP2: Beginn der Versuche mit Kristallinproben vom URL Bukov und URL KURT.
- AP3: Abschluss der 1. Versuchsreihe mit den vier für das russische Endlagerprogramm relevanten Bentoniten. Start der 2. Versuchsreihe mit dem tschechischen Bentonit.
- AP4: Durchführung der Abstimmungen mit Partnern des IGEM RAN zu geplanten und laufenden Laborexperimenten, inkl. Bereitstellung von Probenmaterial. Durchführung der Abstimmungen mit Partnern der TU Darmstadt zu Untersuchungen der Kristallinproben aus Tschechien und Südkorea.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln	Förderkennzeichen: 02 E 11829
Vorhabensbezeichnung: Tonsteinforschung im Felslabor Mont Terri ab Phase 25 (MonTe-25)	
Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit Bereich C1: Standortauswahl, Feld: 1.2	
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2019 bis 30.06.2022	Berichtszeitraum: 01.07.2021 bis 31.12.2021
Gesamtkosten des Vorhabens: 1.026.220,00 EUR	Projektleiter: Dr. Czaikowski

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 Fortführung der Arbeiten zur Tonforschung in Mont Terri in den kommenden Phasen dient

- (1) der Erarbeitung eines fundierten Verständnisses der für die Systementwicklung wichtigen thermisch-hydraulisch-mechanischen (THM) Prozesse,
- (2) der Entwicklung qualifizierter Prozessmodelle durch Vergleich von Modellrechnungen mit Experimenten in situ und im Labor,
- (3) der Sammlung zuverlässiger Daten zum Materialverhalten zur Qualifikation der Prozessmodelle; dazu Entwicklung bzw. Verbesserung von Messmethoden und
- (4) dem Wissenserwerb durch die Zusammenarbeit mit internationalen Fachkollegen.

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, BGR, Obayashi)
- AP3: DM-A Experiment – Langzeitverformungsmessung des Tonsteins in einem Bohrloch
- AP4: Keine Fortführung der Arbeiten zum SB-A Experiment
- AP5: Keine Fortführung der Arbeiten zum DB Experiment
- AP6: Auslagerung weiterführender Arbeiten zum LT-A Experiment in einer eigenen Vorhabenskizze
- AP7: Weiterentwicklung von VIRTUS für den Einsatz im Tonstein
- AP8: Mine-By Experiment (MB-A) in der sandigen Fazies (mit BGR und Swisstopo)
- AP9: CD-A Experiment in der sandigen Fazies (Konsortialführer BGR)
- AP10: Technical und Steering Meetings

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP1: Die GRS verwendet für die Modellierung den FEM-Code CODE_BRIGHT. Die Modellierungsarbeiten werden simultan zu dem Vorgehen im internationalen Projekt DECOVALEX 2023 mit steigender Komplexität durchgeführt. Begonnen wurde mit einem 2-dimensionalen Model und stufenweisem Aufbau zu einer vollen THM-Kopplung. Hierbei kam es sowohl bei der TH-gekoppelten als auch bei der THM-gekoppelten Modellierung zu

einer erheblichen Streubreite in den Ergebnissen der einzelnen Modellierungsteams. Speziell konnte die GRS im Unterschied zu den anderen Ergebnissen in ihren Modellierungen keine Entsättigung des Bentonit-Buffers durch den Wärmeeintrag des Erhitzers feststellen. Der Unterschied lag in der Betrachtung der Gasphase. Während die meisten der anderen Partner den Gasdruck als konstant annahmen, simulierte die GRS die TH-Kopplung mit vollem Zwei-Phasen-Fluss, also auch der Berechnung der Gasgleichungen. Der sich ändernde Gasdruck beeinflusste die Berechnung der Dampfgleichung, wodurch weniger Wasserdampf generiert und somit keine Entsättigung berechnet wurde. Durch Konstanthaltung des Gasdrucks in der Modellierung, konnte die GRS verbesserte Ergebnisse erreichen. Simultan wurden erste Simulationen mit dem 3-dimensionalen Model durchgeführt.

- AP2: Die Messungen wurden fortgeführt, die Messwerte zeigen die Tendenz der Vorjahre. Ein für das 2. HJ vorgesehenes Treffen der Experimentpartner, bei dem die weitere Vorgehensweise (Abkühlung und Rückbau) festgelegt werden sollen, wurde auf Anfang 2022 verschoben.
- AP3: Die Messungen wurden fortgeführt, die Messwerte zeigen eine deutliche Reaktion auf die Streckenerweiterung durch Zunahme der Porendrücke und Temperaturwerte.
- AP9: Im CD-A Experiment wird der Einfluss der Bewetterung auf das hydraulisch-mechanische Verhalten des Opalinustons durch Vergleich der Umgebung einer bewetterten und einer abgeschlossenen Nische überwacht, wobei GRS die Porendruckmessungen im Gebirge übernimmt. Unterschiede im Porendruck als Folge der unterschiedlichen Bedingungen in den beiden Nischen wurden zunächst durch den Tunneleinfluss maskiert. Inzwischen ist ein Verhalten erkennbar, das auf die unterschiedliche Nischenbewetterung zurückzuführen ist (stärkere Absenkung des Porendrucks im Bereich der offenen Nische, aufgrund der stärkeren Bewetterung über Tunnel und Nische als im Bereich der geschlossenen Nische). Neben den Porendruckmessungen beteiligt sich die GRS an den Modellierungsarbeiten. Gemeinsam mit den Kollegen der BGR wurde eine Modellierungsstrategie ausgearbeitet, um eine Vergleichbarkeit der Ergebnisse zu ermöglichen.
- AP10: Teilnahme an den virtuell durchgeführten Steering Meetings im 2. Hj.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Weiterführung der Messungen in den laufenden Experimenten
- Durchführung begleitender Modellierungen zu den laufenden Experimenten

5. Berichte, Veröffentlichungen

Gesa Ziefle, Tuanny Cajuhi, Sebastian Condamin, Stephan Costabel, Oliver Czaikowski, Antoine Fourrière, Larissa Friedenber, Markus Furche, Nico Graebing, Bastian Graupner, Jürgen Hesser, David Jaeggi, Kyra Jantschik, Tilo Kneuker, Olaf Kolditz, Franz Königer, Herbert Kunz, Ben Laurich, Jobst Maßmann, Christian Ostertag-Henning, Dorothee Rebscher, Karsten Rink, Wolfram Rühaak, Senecio Schefer, Rainer Schuhmann, Marc Wengler, and Klaus Wiczorek (2021): From process to system understanding with multi-disciplinary investigation methods: set-up and first results of the CD-A experiment (Mont Terri rock laboratory). Conference Abstract, Saf. Nucl. Waste Disposal, 1, 79–81, <https://doi.org/10.5194/sand-1-79-2021>, 2021

Auftragnehmer: BGE Technology GmbH, Eschenstr. 55, 31224 Peine		Förderkennzeichen: 02 E 11839	
Vorhabensbezeichnung: Entwicklung eines Leitfadens zur Auslegung und zum Nachweis von geotechnischen Barrieren für ein HAW Endlager in Salzformationen (RANGERS)			
Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte, Feld: 2.3			
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2019 bis 31.12.2022		Berichtszeitraum: 01.07.2021 bis 31.12.2021	
Gesamtkosten des Vorhabens: 412.889,06 EUR		Projektleiter: Simo	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Geotechnische Barrieren für ein Endlager in Salzformationen wurden schon im Rahmen zahlreicher Forschungsprojekte behandelt. Im Rahmen der vorläufigen Sicherheitsanalyse für den Standort Gorleben (VSG) wurde ein Nachweisverfahren für die Integrität von Verschlusselementen in einem HAW Endlager in steil-lagernden Salzformationen entwickelt. Im Projekt ELSA wurden Schachtverschlüsse für HAW-Endlager ausführlich behandelt. Erste Empfehlungen zur Planung und Ausführung von geotechnischen Barrieren wurden vom Arbeitskreis Salzmechanik der DGGT formuliert. Die BGE und BGE TECHNOLOGY entwickeln und bauen seit über zehn Jahren Strömungsbarrieren im Endlager Asse. Mittlerweile wurden 32 Strömungsbarrieren im Routinebetrieb gebaut. Ein Prototypabdichtbauwerk wurde von der BGE im realen Maßstab im Endlager Morsleben gebaut und wird gerade wissenschaftlich untersucht. Trotz umfangreichen Wissen und Erfahrung über geotechnischen Barrieren in Salzformationen, fehlt es an Regelwerke für eine qualitätsgesicherte Auslegung solcher Bauwerke für ein HAW-Endlager.

In Kollaboration mit SANDIA National Laboratories setzt sich BGE TECHNOLOGY im Vorhaben RANGERS zum Ziel, einen Leitfaden zu entwickeln, in dem das vorhandene Wissen und die gesammelte Erfahrung über geotechnische Barrieren im Salz in Deutschland und in den USA einfließen. Empfehlungen zur Auslegung und zum Nachweis von geotechnischen Barrieren basierend auf den Stand der Wissenschaft und Technik sind zu formulieren und ein Überblick über neuartige Konzepte, Baustoffe und Technologien, die den Stand der Technik von Morgen prägen werden, wird gegeben.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP0: Organisation der Zusammenarbeit zwischen BGE TEC und SANDIA – Literaturrecherche zu geotechnischen Bauwerken im Salz
- AP1: Zusammenstellung des Standes der Wissenschaft und Technik bei der Planung und Bau von geotechnischen Barrieren für Endlager im Salz
- AP2: Herleitung und Zusammenstellung der Randbedingungen und Anforderungen
- AP3: Entwicklung des Leitfadens zur Auslegung und zum Nachweis von geotechnischen Barrieren für ein HAW-Endlager in Salzformationen
- AP4: Nutzung des Leitfadens für die Auslegung und den Nachweis von geotechnischen Barrieren für ein im FuE-Vorhaben KOSINA entwickelte generische Endlagerkonzepte
- AP5: Bewertung der Ergebnisse und Vergleich mit Erkenntnissen aus früheren Projekten
- AP6: Dokumentation und Abschlussbericht

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP3:

Die Methodenentwicklung zur Auslegung und zum Integritätsnachweis von geotechnischen Barrieren für ein HAW-Endlager in Salzformationen wurde im Berichtszeitraum in enger Abstimmung mit dem amerikanischen Projektpartner abgeschlossen. Das zentrale Merkmal des verfolgten methodischen Ansatzes ist die Behandlung der geotechnischen Barrieren im Zuge einer Sicherheitsuntersuchung eines Endlagersystems im Salz sowie die Bestimmung des Einflusses von diesen auf die Langzeitsicherheit des Endlagersystems. Die Methodik stellt somit ein auf die geotechnischen Barrieren gerichteter Blick der Sicherheitsuntersuchung eines Endlagersystems im Salz dar. Der entwickelte Ansatz wurde in einem eigenen Teilbericht dokumentiert. Der Teilbericht fasst auch das in AP2 entwickelte, generische Endlagerkonzept zusammen. Vorbereitend auf die numerische Umsetzung der Methodik (AP4) wurde ein Modellierungskonzept erstellt.

AP4:

Auf Basis des entwickelten generischen Endlagerkonzeptes wurde die Modellerstellung für die Umsetzung der numerischen Berechnungen weitergeführt. Für alle Nachweisrechnungen soll ein einheitliches Grundmodell genutzt werden. BGE TEC erstellte ein vernetztes Grundmodell des Endlagers und der Geologie im Modellraum. Das Netz des Grundmodells kann in allen eingesetzten Codes (FLAC3D und OGS bei BGE TEC sowie PFLOTRAN bei Sandia) genutzt werden. Im Anschluss wurden die im Modellierungskonzept definierten Teilnachweise umgesetzt.

Rein thermische Berechnungen mit dem Gesamtmodell bildeten den ersten Schritt. Zur Vereinfachung der Modelle wurde in den Einlagerungsstrecken die Wärmeleistung der Abfälle auf die Behälter und das Volumen der Einlagerungsstrecken selbst verschmiert. Ergänzend dazu erfolgte innerhalb von Teilmodellen eine detaillierte Berechnung mit Berücksichtigung der einzelnen Wärmequellen (Behälter). Während das Gesamtmodell eine Prognose zur Temperaturentwicklung an Schacht- und Streckenverschlüssen erlaubt, liefert das Teilmodell der Einlagerungsstrecke einen genauen Temperaturverlauf am Behälter. Im verschmierten Modell wird eine Maximaltemperatur von 130 °C erreicht. Im Teilmodell liegt die Temperatur bei maximal 200 °C, was auch der vorherigen thermischen Auslegung entspricht.

Im zweiten Schritt setzte die BGE TEC thermo-mechanische Berechnungen am Gesamtmodell um. Ziel der Berechnungen ist die Porositätsentwicklung über die Zeit in den Versatzbereichen abzubilden unter Berücksichtigung des visko-elastischen Materialverhaltens des Steinsalzes. Die Modelle zeigen, wie erwartet, eine sehr gute Korrelation zwischen einer beschleunigten Versatzkompaktion und einem hohen thermischen Input durch die Abfälle. Die zeitliche Entwicklung wird als Input an Sandia übergeben und fließt als Randbedingung in die thermo-hydraulische Modellierung (Flüssigkeit und Gas) ein.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP4: Die Teilnachweise gemäß Modellierungskonzept werden weitergeführt. Nach thermischen und thermo-mechanischen Berechnungen werden im weiteren hydraulische Berechnungen durchgeführt. Der Projektpartner Sandia setzt zusätzlich orientierende chemische Berechnungen zur Ermittlung des Korrosionsfortschritts im Schachtverschluss um.

5. Berichte, Veröffentlichungen

E. Simo, P. Herold, A. Keller, A. Lommerzheim, P. Léon-Vargas, E. Matteo, K. Kuhlman, T. Hadgu, R. Jayne, M. Mills (2021): RANGERS: Methodology and Numerical Applications, 11th US/German Workshop on Salt Repository Research, Design, and Operation US-German Workshop

Zuwendungsempfänger: Helmholtz-Zentrum für Umweltforschung GmbH – UFZ -, Permoserstr. 15, 04318 Leipzig		Förderkennzeichen: 02 E 11850A
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Deutsch-chinesische Entsorgungsforschung – Pilotprojekt: Reanalysis of BRIUG THM Mock-up Test (ELF-China-Pilot), Teilprojekt A		
Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit Bereich C3: Sicherheitsnachweis, Feld: 3.1		
Laufzeit des Vorhabens: 01.08.2020 bis 28.02.2022	Berichtszeitraum: 01.07.2021 bis 31.12.2021	
Gesamtkosten des Vorhabens: 69.990,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Shao	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Dieses Pilotprojekt konzentriert sich auf die technischen Barrieren für Endlager der nuklearen Abfälle und wird die THMC-Prozesse in Bentonit (GMZ und MX-80) untersuchen. Die Forschungsaktivitäten werden das Modellierungs- und Laborexperiment zu den physikalischen und chemischen Eigenschaften des chinesischen GMZ-Bentonits sein. Der GMZ-Bentonit wurde von dem Projektpartner Beijing Institute of Uranium Geology (BRIUG) bereitgestellt, und wird in zukünftigen chinesischen Endlagern verwendet. Eines der Projektziele ist die Entwicklung und Kalibrierung der numerischen Modelle, mit denen die physikalischen und chemischen Prozesse vom GMZ-Bentonit simuliert werden können. Dies wird auch durch die im Labor gemessenen Parameter unterstützt. Ein weiteres Ziel des Projekts ist, die Verbindungen mit der chinesischen Wissenschaftsgemeinschaft in der Endlagerforschung herzustellen. Die etablierte Kooperationsbeziehung wird künftige gemeinsame Projekte in den kristallinen Gesteinen im Feldmaßstab ermöglichen. Insbesondere möchten die deutsche Wissenschaftler Zugang zu dem neu errichteten unterirdischen Forschungslabor Beishan bekommen.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Das Verbundforschungsprojekt besteht aus den folgenden Arbeitspaketen (AP):

- AP1: Projektmanagement
- AP2: Systemanalyse (Modellierung)
 - AP2.1: TH²M-Prozessmodellentwicklung
 - AP2.2: RTM-Modellentwicklung (Reactive Transport Processes)
- AP3: Experimente
- AP4: Synthesis & Education

Das UFZ-Team beschäftigt sich im Berichtszeitraum hauptsächlich mit AP1 und AP2.2.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1 Projektmanagement:

Aufgrund der COVID-19-Pandemie ist die ursprünglich geplante Geschäftsreise nach China und der gemeinsame Workshop mit chinesischen Partnern nicht mehr möglich. Stattdessen wurde am 07.12.2021 ein zweitägiger Online-Workshop zur Modellierung des reaktiven Transports erfolgreich organisiert. Drei Kollegen von BRIUG haben an diesem Workshop teilgenommen. Während der Veranstaltung präsentierte das UFZ-Modellierungsteam seine Fortschritte in Bezug auf die neu entwickelten reaktiven Transportfunktionen in OpenGeoSys, die sich auf den Prozess der Radionuklidmigration im Nahfeld eines Endlagers aus Bentonit- und Tongesteinsinformationen konzentrieren. Die BRIUG-Kollegen geben Feedback-Vorschläge zur Kalibrierung und Verbesserung des Modells.

Aufgrund der COVID-19-Situation waren einige Partner in ihrer Laborarbeit eingeschränkt. Auch das UFZ- und TUBAF-Team wünschen mehr Zeit für die Kalibrierung und den Vergleich des Modells. Nach Rücksprache mit allen beteiligten Partnern wurde vereinbart, eine kostenneutrale Verlängerung um 6 Monate für das Projekt zu beantragen.

AP2.2 RTM-Modellentwicklung:

Während des Workshops im Dezember 2021 hat UFZ und BRIUG Kollegen über die Anwendung des entwickelten reaktiven Transportmodells diskutiert. Das Modell wurde durch die Kopplung der Software OpenGeoSys (OGS) mit dem Simulator iPhreeqC erstellt. In der Simulation wurden die Oberflächenkomplexierungsreaktionen des Cäsiums in MX80-Bentonit auf der Grundlage der veröffentlichten Datenbank definiert. Damit wird der Sorptionsprozess für die Cäsiummigration im Bentonit berücksichtigt. Mit Hilfe des Modells kann die Einflusslänge des Cäsiums langfristig abgeschätzt werden. Die Kollegen vom BRIUG haben ihr Interesse bekundet und vorgeschlagen, dasselbe Modell mit Parametern aus dem GMZ-Bentonit zu testen, so dass die Simulationsergebnisse zur Bewertung der Endlagersicherheit in Beishan verwendet werden können. In der Diskussion wurde festgestellt, dass die chemische Zusammensetzung des Porenwassers auf der Grundlage des Mineralgehalts von GMZ-Bentonit berechnet werden muss, was noch nicht abgeschlossen ist. Beide Seiten kamen überein, den Modellvergleich auf der Grundlage des vorhandenen Datensatzes fortzusetzen.

4. Geplante Weiterarbeiten

Wie bereits erwähnt, besteht die nächste Hauptaufgabe darin, das etablierte Cs-MX80-Bentonitmodell auf den GMZ-Bentonit auszuweiten. Außerdem ist geplant, die Retardationswirkung von MX80- und GMZ-Bentonit auf der Grundlage der Ergebnisse der Modellsimulation zu vergleichen.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 11850B	
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Deutsch-chinesische Entsorgungsforschung – Pilotprojekt: Reanalysis of BRIUG THM Mock-up Test (ELF-China-Pilot), Teilprojekt B			
Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit Bereich C3: Sicherheitsnachweis, Feld: 3.1			
Laufzeit des Vorhabens: 01.08.2020 bis 28.02.2022		Berichtszeitraum: 01.07.2021 bis 31.12.2021	
Gesamtkosten des Vorhabens: 25.000,00 EUR		Projektleiter: Dr. Czaikowski	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Pilotprojekt ist zur Vorbereitung der internationalen Kooperation mit China im Bereich der Endlagerforschung in einem zukünftigen chinesischen Untertagelabor „URL Beishan“ in Granite. Es werden vier Themenbereiche betrachtet: (1) sozial-technische Aspekte; (2) Modellierung; (3) Laboruntersuchung; und (4) Ausbildung. Das ist ein Verbundprojekt mit zahlreicher deutschen und chinesischen Beteiligungspartnern (BGR, GRS, TUBAF, TUC, UFZ, FSU, KIT; BRIUG, TONGI-U). Der Hauptaufgaben des Pilotprojekts sind Modellierung des China-Mock-Up-Experiments und Vorbereitung der Laboruntersuchung zur Bestimmung der THMC-Eigenschaften von GMZ-Bentonit aus China und MX80-Bentonit aus der USA.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Das Pilotprojekt wird von allen Partnern in fünf Arbeitspaketen durchgeführt:

AP1: Projektmanagement

AP2: Modellierung der THM-Prozesse im Bentonit im China-Mock-Up-Experiment

AP3: Vorbereitung auf Laboruntersuchung zur Bestimmung THMC-Eigenschaften von Bentoniten GMZ und MX80

AP4: Synthese und Ausbildung

AP5: Sozial-technische Forschung

GRS ist an AP3 beteiligt.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Drei Versuchsverfahren sind entwickelt worden, um THM-Eigenschaften vom Bentonit GMZ und MX80 zu untersuchen.

- Die Wasseraufnahmefähigkeiten bzw. Wasserrückhaltbarkeiten der Bentonite wurden durch Messung von Wassergehalten der Proben bei unterschiedlicher Luftfeuchtigkeitswerten ermittelt. Der Zusammenhang zwischen Wassergehalt und Saugspannung oder relativer Luftfeuchtigkeit ist für jeden Bentonit GMZ01, GMZ02 und MX80 bestimmt worden.
- Ein Versuchssystem mit zehn Stahlzellen wurden zusammengebaut und getestet, um Quelldruck, Wasserpermeabilität und Gasdurchbruchdruck bzw. Gaspermeabilität von kompaktierten Bentoniten mit unterschiedlicher Dichten zu ermitteln. Vortests mit zehn Bentonit-Proben sind im Lauf.
- Eine weitere Prüfanlage wurde mit vier Stahlzellen gebaut, um Quellverformung, Wasserpermeabilität, Gastransport in Bentoniten bei unterschiedlichen Spannungen und Temperaturen zu bestimmen.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Weiterführung der Messung von Quelldruck, Wasserpermeabilität und Gasdurchbruchdruck für die Bentonite GMZ01, GMZ02 und MX80

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Technische Universität Bergakademie Freiberg, Akademiestr. 6, 09599 Freiberg		Förderkennzeichen: 02 E 11850C
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Deutsch-chinesische Entsorgungsforschung – Pilotprojekt: Reanalysis of BRIUG THM Mock-up Test (ELF-China-Pilot), Teilprojekt C		
Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit Bereich C3: Sicherheitsnachweis, Feld: 3.1		
Laufzeit des Vorhabens: 01.08.2020 bis 28.02.2022	Berichtszeitraum: 01.07.2021 bis 31.12.2021	
Gesamtkosten des Vorhabens: 89.993,50 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Nagel	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Pilotprojekt konzentriert sich auf die Funktionalität der technischen Barrieren für die Endlagerung von radioaktiven Abfällen und wird dabei die entsprechenden THMC-Prozesse in Bentoniten (GMZ und MX-80) untersuchen. Die Forschungsaktivitäten innerhalb des ersten Jahres werden sich hauptsächlich mit Modellierungsarbeiten befassen, um das grundlegende Verständnis für den Langzeitverschluss in verschiedenen Endlagertypen weiter zu verbessern. Die wichtigsten Ergebnisse werden mit Hilfe moderner Kommunikationsmethoden (VR) synthetisiert. Der Schwerpunkt der Forschungsaktivitäten innerhalb der Pilotphase ist dem BRIUG THM Mock-up Test zur Eignung von GMZ-Bentonit als geotechnische Dichtung für wärmeentwickelnde radioaktive Abfälle gewidmet.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Das Pilotprojekt wird sich zunächst auf ausgewählte experimentelle Untersuchungen und numerische Modellierung des chinesischen Mock-up-Tests konzentrieren, insbesondere mit der Untersuchung von THM-Prozessen in verschiedenen Bentonit-Barriersystemen. Die Projektaktivitäten sind in fünf Arbeitspakete gegliedert. Die Hauptteile (WP2 Systemanalyse und WP3 Experimente) sind der kombinierten Modellierung und experimentelle Arbeiten an GMZ- und MX-80-Bentoniten gewidmet.

In diesem Teilvorhaben werden vorrangig Beiträge zur THM Modellierung des China Mock-Up Versuches in WP2 geliefert. Darüber hinaus werden begleitende experimentelle, gesteinsphysikalische Arbeiten an Beishan Granit durchgeführt. Diese dienen als Start- und Anknüpfungspunkte für das Verbundprojekt, das an das Pilotprojekt anschließen wird, und auf THM/C – gekoppelte Prozesse im kristallinen Wirtsgestein fokussiert ist.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Zur Durchführung der THM Simulationen des China-Mock-Up Versuches wurden Prozessmodelle in OpenGeoSys implementiert und getestet, mit denen anschließend axialsymmetrische Modelle des China Mock-Up Versuches berechnet wurden. Diese Modelle bilden die im Experiment beobachteten Phänomene basierend auf einer Kalibrierung an den Versuchsdaten grundlegend ab.

Die folgenden Arbeiten wurden im Berichtszeitraum durchgeführt:

- Verbesserungen des Konvergenzverhaltens der Prozessmodelle für eine effizientere numerische Simulation. Damit wurde der Übergang von axialsymmetrischen zu dreidimensionalen Berechnungsmodellen möglich. Letztere sind im vorliegenden Fall von Interesse, da die Aufsättigung im Experiment nur an vier über den Umfang des Aufbaus verteilten Positionen erfolgte, wodurch ein axialsymmetrisches Modell nur eine sehr grobe erste Näherung darstellt.
- Parameterstudien hinsichtlich des Wärmeübergangs untersuchten unterschiedliche Möglichkeiten der Abbildung der thermischen Versuchsrandbedingungen. Dazu zählten das Aufbringen der gemessenen Temperaturschwankungen im Versuchslabor direkt auf den Rand des Bentonitkörpers, auf den Stahltank oder auf die Isolation sowie die Abbildung eines konvektiven Wärmeübergangs über eine Randbedingung dritter Art.
- Der Einfluss der Berücksichtigung des Quelldrucks im Bentonit wurde systematisch untersucht. Dazu wurden bei der Spannungsberechnung von der Sättigungsänderung abhängige Anteile im Modell berücksichtigt. Zur Parametrisierung fand ein Austausch mit den Partnern der TU Clausthal statt.

Nach Klärung der rechtlichen und zolltechnischen Fragen konnte der Transport der vorausgewählten Bohrkernproben von China nach Deutschland erfolgen. Das gesamte Probematerial des deutschen Projektteams wurde im Dezember 2021 an die BGR Hannover geliefert. An der BGR sind petrographische, geowissenschaftliche und mineralogisch-geochemische Untersuchungen am Granitgestein und den enthaltenen Kluftfüllungen geplant. Nach Entnahme des Probematerials für die eigenen Untersuchungen an der BGR konnten die restlichen Bohrkernende letzter Woche an die TU Freiberg geholt werden. Aktuell wird das zur Verfügung gestellte Kernmaterial von uns gesichtet und aufgenommen.

4. Geplante Weiterarbeiten

Folgende Arbeitsschritte sind für die folgenden Berichtszeiträume geplant:

- Weitere Präzisierung der Randbedingungen sowie Materialparameter im Austausch mit den chinesischen Partnern, um Lücken und Widersprüche in der publizierten Literatur zum Experiment zu schließen.
- Durch die Quellprozesse verursachte Änderungen der absoluten und effektiven Porosität werden in ihrer Wirkung auf die Permeabilität des Bentonits berücksichtigt. Dieser Effekt ist vor allem für den zeitlichen Verlauf der Wiederaufsättigung wichtig.
- Weiterführung der experimentellen Arbeiten anhand des Probenmaterials aus Beishan.

Um die weitere wissenschaftliche Bearbeitung durch die Kollegen der Uni Jena, der GRS Braunschweig und uns selbst an der TUBAF mit den Schwerpunkten Charakterisierung der Gesteinsmatrix, von Klüften sowie Beschreibung von Fluidwegsamkeiten zu ermöglichen, werden nun die für die einzelnen Untersuchungsmethoden relevanten Probenabschnitte ausgewählt und die Kerne entsprechend konditioniert. Danach werden die entnommenen Probenabschnitte an die Projektpartner verteilt werden. Wir haben bereits Kontakt mit den Partnern an den genannten Organisationen aufgenommen und werden den Probentransport in den nächsten beiden Wochen organisieren.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Die bisherigen Arbeiten sind in internen Berichten für die Modelldokumentation zusammengefasst. Zudem wurden Teile der Arbeiten bei eingeladenen Vorträgen (Chinese Academy of Sciences; École Nationale des Ponts ParisTech, Laboratoire Navier) präsentiert (ohne Schriftbeitrag). Eine Veröffentlichung ist jedoch in den folgenden Berichtszeiträumen geplant.

Zuwendungsempfänger: Technische Universität Clausthal, Adolph-Römer-Str. 2a, 38678 Clausthal-Zellerfeld		Förderkennzeichen: 02 E 11850D
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Deutsch-chinesische Entsorgungsforschung – Pilotprojekt: Reanalysis of BRIUG THM Mock-up Test (ELF-China-Pilot), Teilprojekt D		
Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit Bereich C3: Sicherheitsnachweis, Feld: 3.1		
Laufzeit des Vorhabens: 01.08.2020 bis 28.02.2022	Berichtszeitraum: 01.07.2021 bis 31.12.2021	
Gesamtkosten des Vorhabens: 70.072,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Düsterloh	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Übergeordnetes Ziel des Verbundforschungsvorhabens ist es, geotechnische Fragestellungen zur Funktionalität von Abdichtungselementen aus Bentonit für die Endlagerung radioaktiver Abfälle in einer längerfristigen, vertieften, nachhaltigen und strukturierten Kooperation zwischen Deutschland und China zu bearbeiten. Neben wissenschaftlichen Arbeiten im Bereich laborativer, feldbezogener und numerischer Untersuchungen, sollen durch die Entwicklung und Installation eines Ausbildungs- und Traineeprogrammes Kompetenzen und Erfahrungen im Bereich der Endlagerung radioaktiver Abfälle ausgetauscht werden. Schwerpunkte des hier vom Projektpartner TUC beantragten Pilotprojektes sind (a) numerisch-rechnerische Reanalysen des THM Mock-up Tests von BRIUG mit dem Ziel aufzuzeigen, ob und inwieweit unter Berücksichtigung der im Versuch realisierten THMC-Einwirkungen die dokumentierten Messwerte abgebildet und nachvollzogen werden können und (b) laborative Untersuchungen zur Bestimmung der 2-Phasenfluss-Eigenschaften von Bentonit durchzuführen.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- WP1: Projektmanagement (TUBAF und UFZ)
- WP2: Numerische Reanalyse des BRIUG THM Mock-up Tests
- WP3: Laborative Untersuchungen zum 2-Phasenfluss-Verhalten von Bentonit
- WP4: Projektbezogenes Fortbildungs- und Traineeprogramm für wiss. Mitarbeiter und Studenten
- WP5: Schlussbericht

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

WP2:

Durchführung von prognostischen numerischen Simulationen zu den am Lehrstuhl für Geomechanik und multiphysikalische Systeme der TU Clausthal geplanten laborativen Untersuchungen an Bentonit zur Ermittlung seiner Zweiphasenflusseigenschaften (funktionale Beziehung zwischen Sättigungsgrad und Kapillardruck und funktionale Beziehung zwischen Sättigungsgrad und fluidbezogenen Relativpermeabilitäten) unter Verwendung des FTK-Simulators.

WP3:

Durchführung von ersten Laborversuchen an höher-permeablen Dummy-Prüfkörpern zur vertieften Kontrolle der Funktionalität der konstruierten Laborversuchsanlage und der semipermeablen Membranen zur Messung von Zweiphasenflusseigenschaften (funktionale Beziehung zwischen Sättigungsgrad und Kapillardruck) der Dummy-Prüfkörper.

Planung und Durchführung erster Laborversuche an Bentonit-Prüfkörpern zur Messung von Quelldrücken.

Literaturrecherche geeigneter laborativer Messmethoden und Planung eines Versuchs zur Ermittlung der Einphasenfluss- und Zweiphasenflusseigenschaften von Bentonit (z. B. Wasseraufnahme während Quellprozess, Wasserpermeabilität, Gaspermeabilität, Gaseindringdruck) für ein avisiertes Folgeprojekt.

WP 5:

Beginn Erstellung Schlussbericht.

4. Geplante Weiterarbeiten

WP2:

Vorbereitung numerischer Simulationen mit dem Simulator FLAC3D7.0-TOUGH3.

WP3:

Fortführung der Laborversuche an Bentonitprüfkörpern zur Messung von Quelldrücken in Abhängigkeit von der Trockendichte.

Vorbereitung des geplanten Versuchs zur Ermittlung der Einphasenfluss- und Zweiphasenflusseigenschaften von Bentonit (z. B. Wasseraufnahme während Quellprozess, Wasserpermeabilität, Gaspermeabilität, Gaseindringdruck) für ein avisiertes Folgeprojekt.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Friedrich-Schiller-Universität Jena, Fürstengraben1, 07743 Jena		Förderkennzeichen: 02 E 11850E
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Deutsch-chinesische Entsorgungsforschung – Pilotprojekt: Reanalysis of BRIUG THM Mock-up Test (ELF-China-Pilot), Teilprojekt E		
Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit Bereich C3: Sicherheitsnachweis, Feld: 3.1		
Laufzeit des Vorhabens: 01.08.2020 bis 28.02.2022	Berichtszeitraum: 01.07.2021 bis 31.12.2021	
Gesamtkosten des Vorhabens: 15.104,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Schäfer	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Ein wesentlicher Bestandteil des Multi-Barriere-Systems für die tiefgeologische Entsorgung von hochradioaktiven Abfällen ist die geotechnische Barriere (Bentonit). Im Rahmen des chinesisch-deutschen Pilotprojekts sind Voruntersuchungen zu THMC Prozessen geplant, insbesondere in Bezug auf GMZ-Bentonit im Vergleich zu bereits vorhandenen Daten zu MX-80 Bentonit. Zwei Aspekte werden von FSU in enger Kooperation mit KIT-INE hauptsächlich untersucht:

- Die Rolle von akzessorischen Gemengteilen neben Montmorillonit auf das Erosionsverhalten (Barriere-Integrität) und
- die Wechselwirkung von korrodierenden Kanister-Materialien mit dem GMZ-Bentonit.

Basierend auf den beiden Hauptthemen dieser Pilotstudie ist der folgende Arbeitsplan vorgesehen: Charakterisierung und Quantifizierung der akzessorischen Mineralien in GMZ-Bentonit (Mineralogie, Korngrößenverteilung, Reaktivität) und Erosionsexperimente unter glazialen Schmelzwasserbedingungen und Kanister-Korrosionsmaterialanalyse in Präsenz von GMZ-Bentonit. Die Einrichtung der ersten reaktiven Modelle, insbesondere für HMC-Prozesse wird parallel geplant. Beide Aktivitäten sollen in enger Zusammenarbeit mit den chinesischen Forschungsgruppen durchgeführt werden.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Projekt Management
- AP2: System Analyse (Modellierung)
 - AP2.1: TH²M Prozesse
 - AP2.2: Reaktive Transport Prozesse
- AP3: Experimente
 - AP3.1: TH²M Prozesse
 - AP3.2: Reaktive Transport Prozesse
- AP4: Synthese & Ausbildung
 - AP4.1: Virtuelles URL Konzept
 - AP4.2: Ausbildungs- und Workshop Programm

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP2.2: Die bisher durchgeführten und weiterhin geplanten Aktivitäten fokussieren sich auf theoretische Arbeiten. Das Manuskript Huber et al. (2021) der Partner KIT-INE und FSU wurde in International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences publiziert.

AP3.2: Auf Grund der Schließung der Laborbereiche im Zuge der Corona-Pandemie sind einige der geplanten präparativen Vor-Arbeiten nicht oder nur zum Teil durchgeführt worden. Die GMZ Materialien mit Bezeichnung GMZ24-200 und GMZ-001 stehen beiden Partnern (KIT- INE und FSU) nun für die Versuchsdurchführung zur Verfügung. Die Aufreinigung der GMZ Proben und Separation des Natrium-ausgetauschten Tonmineralanteils ist abgeschlossen.

Das experimentelle Setup zur Quantifizierung der Bentoniterosion unter glazialen Schmelzwasserbedingungen, hier natürliches und modifiziertes Grimsel Grundwasser (GGW), und dem Einfluss von akzessorischen Gemengteilen mit MX-80 Bentonit sind experimentell nahezu abgeschlossen (Aktivitäten im Projekt KOLLORADO-e³). Die geplante Durchführung von Versuchen unter identen Versuchsbedingungen mit den beiden Chargen des GMZ Roh-Materials (001, 24-200) wurde erfolgreich nach einer Laufzeit von 77 Tagen abgeschlossen. Dabei wurden Proben-tabletten von je ca. 1 g in ein künstliches Riss-Setup eingesetzt (Apertur = 1 mm, Durchmesser = 82 mm), welche mit GGW bei einer konstanten Fließrate von 50 µL/min durchspült wurden. Unterschiedlich hohe Quelldrücke wurden dabei für die Proben gemessen, wobei der GMZ-001 etwas höhere Drücke erreichte als der GMZ-24-200 (räumlich aufgelöster Druck: 532 > 449 kPa; max. Druck: 1127 > 866 kPa). Auch das Quellverhalten zeigte unterschiedliche Ausprägung mit einer fließrichtungsorientierten Ausbreitung der Gelschicht hin zum Auslauf der künstlichen Kluft. Die maximalen Radii der Quellung lagen bei Probe GMZ- 001 bei 29 mm und bei GMZ-24-200 Bentonit bei 21 mm in die 1 mm parallele Kluft. Des Weiteren zeigte der Kontaktbereich mit dem GGW (Gel-Grenzfläche) eine deutlich schärfere Grenze beim GMZ- 001, wohingegen diese beim GMZ-24-200 eher als diffustransparent zu beschreiben war. Durchgeführte Kolloidmessungen mittels Nanoparticle-Tracking-Analyse (NTA) ergaben eine durchschnittliche Erosionsfracht beider Proben von ca. $3.0E+09 \pm 1.0E+08$ Partikeln pro mL für diesen Zeitraum. Eine Abschwächung der Erosion auf eine Konzentration von etwa $2.0E+08 \pm 1.0E+07$ Partikeln pro mL war für beide Versuche nach etwa neun Wochen zu beobachten.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP2.2: Fortführung der theoretischen Arbeiten und geplante Einbindung der µCT/XRM-Daten einer realen Kluft-Geometrie in das Modell von Huber et al. (2021).

AP3.2: Durchführung von Bentoniterosions-Experimenten mit den aufgereinigten Tonfraktionen unter Zusatz von reinen Quarzmehlanteilen und/oder einem Ca-Träger (wahrscheinlich im Falle von GMZ Calcit, da dieser auch als natürliches akzessorisches Gemengteil in dem Material vorkommt).

5. Berichte, Veröffentlichungen

Huber, F.M., Leone, D., Trumm, M., Moreno, L.R., Neretnieks, I., Wenka, A., Schäfer, T. (2021): Impact of rock fracture geometry on geotechnical barrier integrity – A numerical study. International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences 142, 104742

Zuwendungsempfänger: Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Hermann-von-Helmholtz-Platz 1, 76344 Eggenstein-Leopoldshafen		Förderkennzeichen: 02 E 11850F
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Deutsch-chinesische Entsorgungsforschung – Pilotprojekt: Reanalysis of BRIUG THM Mock-up Test (ELF-China-Pilot), Teilprojekt F		
Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit Bereich C3: Sicherheitsnachweis, Feld: 3.1		
Laufzeit des Vorhabens: 01.08.2020 bis 28.02.2022	Berichtszeitraum: 01.07.2021 bis 31.12.2021	
Gesamtkosten des Vorhabens: 10.270,50 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Geckeis	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Ein wesentlicher Bestandteil des Multi-Barriere-Systems für die tiefgeologische Entsorgung von hochradioaktiven Abfällen ist die geotechnische Barriere (Bentonit). Im Rahmen des chinesisch-deutschen Pilotprojekts sind Voruntersuchungen zu THMC Prozessen geplant, insbesondere in Bezug auf GMZ-Bentonit im Vergleich zu bereits vorhandenen Daten zu MX-80 Bentonit. Zwei Aspekte werden von KIT-INE in enger Kooperation mit FSU hauptsächlich untersucht:

- Die Rolle von akzessorischen Gemengeteilen neben Montmorillonit auf das Erosionsverhalten (Barriere-Integrität) und
- Die Wechselwirkung von korrodierenden Kanister-Materialien mit dem GMZ-Bentonit.

Basierend auf den beiden Hauptthemen dieser Pilotstudie ist der folgende Arbeitsplan vorgesehen: Charakterisierung und Quantifizierung der akzessorischen Mineralien in GMZ-Bentonit (Mineralogie, Korngrößenverteilung, Reaktivität) und Erosionsexperimente unter glazialen Schmelzwasserbedingungen und Kanister-Korrosionsmaterialanalyse in Präsenz von GMZ-Bentonit. Die Einrichtung der ersten reaktiven Modelle, insbesondere für HMC-Prozesse wird parallel geplant. Beide Aktivitäten sollen in enger Zusammenarbeit mit den chinesischen Forschungsgruppen durchgeführt werden.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Projekt Management
- AP2: System Analyse (Modellierung)
 - AP2.1: TH²M Prozesse
 - AP2.2: Reaktive Transport Prozesse
- AP3: Experimente
 - AP3.1: TH²M Prozesse
 - AP3.2: Reaktive Transport Prozesse
- AP4: Synthese & Ausbildung
 - AP4.1: Virtuelles URL Konzept
 - AP4.2: Ausbildungs- und Workshop Programm

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP3.2: GMZ Bentonit wurde in zwei Diffusionszelle mit jeweils einem Magnetitpellet unterschichtet und unter Ar-Atmosphäre mit einer hydraulischen Presse auf eine Trockendichte von $1,58 \text{ g/cm}^3$ bzw. $1,68$ verdichtet. Die Zellen wurden nun mit einem synthetischen granitischen Grundwasser der Gansu Beishan Region vorbehandelt (T. Wu et al., 2014, Appl. Clay Sci., 101). Diffusionsexperimente mit den konservativen Radionuklidtracern ^{36}Cl und tritiiertem Wasser (je 1000 Bq/L) wurden begonnen, um Änderungen in Porositäten und damit verbundene zeitliche Änderungen der Diffusionskoeffizienten zu untersuchen. Vergleichende Untersuchungen finden in parallel laufenden Untersuchungen mit MX-80 Bentonit statt. Diffusionsexperimente mit $^{137}\text{Cs(I)}$ und $^{60}\text{Co(II)}$ als sorbierende Tracer werden vorbereitet und anschließend an die laufenden Experimente durchgeführt.

Wie bereits berichtet, wurden im INE Experimente zur Bentoniterosion mit einer Anordnung, bei der ein GMZ-Bentonitpellet mit einer Edelstahlfritte fixiert wird, komplementär zu den FSU Untersuchungen mit einem Plexiglas Aufbau begonnen. Allerdings wurden sie wegen einer defekten Schlauchpumpe nicht weitergeführt. Derzeit erfolgt die Vorbereitung für ein neues Experiment mit dem bereits oben genannten synthetischen Granitwasser.

Insgesamt finden die Experimente aufgrund von Personalwechsel und technischen Problemen gegenüber dem ursprünglichen Zeitplan verzögert statt.

4. Geplante Weiterarbeiten

Die Experimente zur Aufklärung des Einflusses von Korrosionsprodukten und Tonalterationsphasen auf die Radionuklidmigration werden weitergeführt. Die Daten aus den Diffusionsexperimenten mit Radiotracer werden ausgewertet und mit den entsprechenden Laboruntersuchungen mit MX-80 Bentonit (im Rahmen des iCROSS Experiments) verglichen. Post-mortem Untersuchungen an den Bentonitproben erfolgen mittels Röntgentomographie, Autoradiographie sowie ggfs. mit synchrotronbasierten Spektroskopiemethoden (μXAS). Ergebnisse der Experimente werden mit den Laboruntersuchungen (iCROSS) und den URL Experimenten (MACOTE) an MX-80 verglichen.

Erosionsexperimente werden wiederaufgenommen. Die Bentoniterosion mit einem synthetischen Wasser, das die Zusammensetzung des Grundwassers in der Beishanregion simuliert, werden mit parallel laufenden Experimenten mit MX-80 Bentonit verglichen.

Daten beider Experimente werden zusammengefasst und in einem Bericht diskutiert.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Huber, F. M., D. Leone, M. Trumm, L. Moreno, I. Neretnieks, A. Wenka, T. Schäfer (2021): Impact of fracture geometry on bentonite erosion - a numerical study, Int. J Rock Mech. Min.; in review

Zuwendungsempfänger: Johannes Gutenberg-Universität Mainz, Saarstr. 21, 55122 Mainz		Förderkennzeichen: 02 E 11860A
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt A		
Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit Bereich C3: Sicherheitsnachweis, Feld: 3.1		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2020 bis 30.09.2023	Berichtszeitraum: 01.07.2021 bis 31.12.2021	
Gesamtkosten des Vorhabens: 571.271,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Reich	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Thema des Forschungsvorhabens ist die Rückhaltung von Actiniden im Nahfeld eines Endlagers für wärmeentwickelnde radioaktive Abfälle in Tonsteinformationen Norddeutschlands gemäß dem Standortmodell NORD. Für den Sicherheitsnachweis eines solchen Endlagers gibt es Wissenslücken zum Einfluss von gelöstem Eisen, das bei der Korrosion der Einlagerungsbehälter freigesetzt wird sowie von organischen Liganden, die aus der Beton- bzw. Zementkorrosion der technischen Barriere resultieren. Eine Besonderheit des Standortmodells NORD besteht in der mittleren bis hohen Ionenstärke der Formationswässer des Tongesteins. Deshalb wird der Einfluss von Eisen sowie der organischen Liganden auf die Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen unter hyperalkalinen Bedingungen bei mittleren bis hohen Ionenstärken quantifiziert werden. Dazu werden die Prozesse Sorption, Diffusion, Komplexierung und Redoxtransformation mit experimentellen Methoden studiert, auf molekularer Ebene aufgeklärt und mit thermodynamischen Modellen beschrieben. Auf der Basis der in diesem Projekt und dem vorhergehenden Verbundvorhaben GRaZ I erzielten Ergebnisse soll kritisch bewertet werden, in wieweit vorhandene Befunde für Systeme niedriger Ionenstärke auf die Bedingungen mittlerer bis hoher Ionenstärke gemäß dem Standortmodell NORD anwendbar sind. Dazu werden auch die im Rahmen des europäischen Projektes CORI erzielten Ergebnisse herangezogen. Im Rahmen des Verbundprojekts wird schwerpunktmäßig mit dem Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf, dem Karlsruher Institut für Technologie, der Universität des Saarlandes, der Universität Potsdam und der TU München zusammengearbeitet.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- Einfluss von Fe(II) auf die Rückhaltung von Actiniden an Zementphasen bei mittleren bis hohen Ionenstärken
- Einfluss von niedermolekularen organischen Liganden auf die Rückhaltung von Actiniden an Zementphasen bei mittleren bis hohen Ionenstärken
- Komplexierung von Actiniden mit ausgewählten organischen Referenzliganden

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

In Batchexperimenten wurde der Einfluss von Gluconat ($c(\text{GLU}) = 1,0 \times 10^{-2} \text{ M}$) auf die Sorption von $^{239}\text{Pu}(\text{IV})$ ($c(\text{Pu}(\text{IV})) = 1,0 \times 10^{-8} \text{ M}$) an Zementstein (HCP, w/z = 0,5, 5 g/L) in Gegenwart von Zementporenwasser auf Basis der verdünnten Gipshuttlösung (ACW-VGL, pH = 12,5) unter Ar-Atmosphäre untersucht. Dabei wurde die Reihenfolge der Zugabe von Pu(IV) und GLU variiert. Der Abstand der Zugaben bzw. die Kontaktzeit betrug immer 72 h. Bei den Experimenten zeigte sich, dass die Variation der Zugabe von GLU bzw. die Kinetik einen wesentlichen Einfluss auf die Sorption von Pu(IV) an HCP hat. In Abwesenheit von GLU und bei Zugabe von zuerst Pu(IV) und anschließend GLU wurde eine nahezu quantitative Sorption ($\geq 93 \%$) erhalten. Bei gleichzeitiger Zugabe von Pu(IV) und GLU betrug die Sorption von Plutonium nur ca. 26 %. Bei der Reihenfolge von zuerst GLU und dann Pu(IV) war die Pu-Sorption mit ca. 5 % sehr gering.

Zur Charakterisierung der elektrochemischen Zelle (ECC) für die geplanten Untersuchungen zum Einfluss von Fe(II) auf die Sorption von Pu(IV) an HCP wurde zuerst die Stabilität des Ruhepotentials nach der Elektrolyse von Fe(II) ($c(\text{Fe}(\text{II})) = 5,0 \times 10^{-5} \text{ M}$) in ACW-VGL (pH = 12,2) untersucht. Dabei wurde das Potential in Lösung für 15 h unter Ar-Atmosphäre im Bereich von Fe(II) gehalten. Über den gesamten Experimentzeitraum von fünf Tagen waren die Redoxbedingungen stabil und es wurde keine Ausfällung von Eisenhydroxid beobachtet. Dies stimmt mit Literaturangaben von Mancini et al. (2021) überein.

Zur Vorbereitung von Experimenten zur Sorption von Fe(II) an HCP wurde die Konzentration von Fe, das in ACW-VGL bzw. in einer Suspension aus HCP/ACW-VGL (5 g/L) enthalten ist, nach 13 Tagen Elektrolyse in der ECC mittels ICP-MS (ORS, He Gas) bestimmt. Dabei lag die Fe-Konzentration in ACW-VGL bei $c(\text{Fe}) = 6,5 \times 10^{-8} \text{ M}$ und in der HCP-Suspension bei $3,8 \times 10^{-7} \text{ M}$. Aufgrund dieser bereits durch die chemischen Bestandteile verursachten Untergrundkonzentration an Fe, müssen für die geplanten Sorptionsisothermen entsprechend höhere Fe-Konzentrationen gewählt werden.

Drei filterfreie Diffusionszellen wurden Anfang September für Versuche zur Diffusion von Actiniden in An- und Abwesenheit von GLU in Betrieb genommen. Mittels der HTO-Durchdiffusion ($c(\text{HTO}) = 1,6 \times 10^{-9} \text{ M}$) mit ACW-VGL (pH = 12,6) als mobile Phase werden die Diffusionsparameter (α und D_e) von HTO in den HCP-Kernen (w/z = 0,5, Dicke = 6 mm, $\emptyset = 25 \text{ mm}$) bestimmt. Die Durchdiffusion läuft noch bis Ende Februar.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Aufnahme der Sorptionsisotherme von Th(IV) im ternären System Th(IV)/GLU/HCP
- Batchexperimente in der ECC zur Sorption von Pu(IV) an HCP in Gegenwart von gelöstem Fe(II) unter hyperalkalinen und anaeroben Bedingungen in ACW-VGL
- Beginn von Diffusionsexperimenten mit Np(V) und Pu(IV) in HCP und ACW-VGL unter anaeroben Bedingungen

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e. V., Bautzner Landstr. 400, 01328 Dresden		Förderkennzeichen: 02 E 11860B
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt B		
Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit Bereich C3: Sicherheitsnachweis, Feld: 3.1		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2020 bis 30.09.2023	Berichtszeitraum: 01.07.2021 bis 31.12.2021	
Gesamtkosten des Vorhabens: 426.606,00 EUR	Projektleiter: Dr. Schmeide	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Schwerpunktmäßig soll der Einfluss von Eisen sowie von organischen Liganden auf die Freisetzung bzw. Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide (U, Cm, Pu) in Systemen mit Zementphasen, Tonmineralphasen und Ca-Bentonit als Puffermaterial in hyperalkalinen Medien mittlerer bis hoher Ionenstärke untersucht werden. Hierfür werden Batch-Sorptionsexperimente und spektroskopische Methoden kombiniert. Im Mittelpunkt der Untersuchungen stehen niedere Oxidationsstufen der Radionuklide. Dabei soll der Einfluss von Fe(II) bzw. von Fe(III) bezüglich konkurrierender Effekte auf die Rückhaltung bzw. Komplexierung von Actiniden identifiziert werden. Weiterhin soll der Einfluss von Fe(II) auf die Redoxstabilität von Actiniden in höheren Oxidationsstufen speziell für U und Pu untersucht werden. Die Stabilität Actinid-dotierter Phasen in komplex zusammengesetzten Lösungen erhöhter Ionenstärke wird untersucht. Spektroskopische Untersuchungen der binären Uran(VI,IV)-Ligand-Systeme werden durchgeführt, um molekulare Strukturen und Komplexbildungskonstanten im zementrelevanten pH-Bereich zu ermitteln. Die geplanten Batchsorption- und Komplexierungsexperimente in Kombination mit sich jeweils ergänzenden spektroskopischen Methoden liefern komplementäre Informationen (sowohl zu chemischen Alterationsprozessen als auch zu strukturellen Veränderungen), die zu einem detaillierten mechanistischen Verständnis der Radionuklid-Immobilisierung unter Endlagerbedingungen beitragen. 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

- Uran-Rückhaltung an C-S-H-Phasen unter reduzierenden Bedingungen – Einfluss niedermolekularer organischer Liganden
- Curium(III)-Rückhaltung an C-(A-)S-H-Phasen – Einfluss von Fe(III)
- Plutonium-Rückhaltung an C-(A-)S-H-Phasen – Einfluss von Fe(II), Fe(III)
- Uran-Rückhaltung an Ca-Bentonit unter reduzierenden Bedingungen – Einfluss niedermolekularer organischer Liganden
- Plutonium-Rückhaltung an Ca-Bentonit unter reduzierenden Bedingungen – Einfluss von Fe(II)
- Uran(VI)- und Uran(IV)-Komplexierung mit kleinen organischen Molekülen
- Nachwuchsförderung im Bereich der nuklearen Entsorgung
- Transfer der Erkenntnisse und Integration der Ergebnisse für den Sicherheitsnachweis

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- Der Einfluss von Citrat (0.1 - 50 mM) auf die U(VI)-Rückhaltung an Ca-Bentonit wurde untersucht. Bei pH 10 wird durch ≥ 10 mM Citrat die U(VI)-Sorption an Bentonit stark reduziert. Die Erniedrigung der U(VI)-Sorption bei pH 8-12 durch 50 mM Citrat wird auf U(VI)-Citrat-Komplexbildung in Lösung zurückgeführt. Mittels TRLFS wurden zwei unterschiedliche Spezies nachgewiesen. Bei pH ≥ 12.5 ist der Einfluss von Citrat gering.
- Der U(VI)-Bindungsmechanismus in Uran(VI)-haltigen C-A-S-H-Phasen (Ca/Si: 0.8, 1.2, 1.6; Al/Si: 0, 0.06, 0.18) wurde mittels Lumineszenzspektroskopie (TRLFS) ermittelt. Mit Untersuchungen der Eu(III)/Cm(III)-Rückhaltung an C-A-S-H-Phasen gleicher Zusammensetzung wurde begonnen. Gegenwärtig wird die Stabilität der U(VI)- bzw. Eu(III)-dotierten Zementphasen bei erhöhten Ionenstärken untersucht. Untersuchungen zum Einfluss von Organik (Gluconat, NTA) auf die Radionuklidrückhaltung wurden begonnen.
- Für eine spätere zuverlässige Beschreibung des ternären Systems (Zementphase–Organik–Radionuklid), wird mittels NMR-Spektroskopie zunächst das binäre System (Radionuklid–Organik) in wässriger Lösung untersucht. Als Stellvertreter der organischen Moleküle liegt der Fokus auf Nitrilotriessigsäure (NTA). Anhand einer pH-Titration werden zunächst die pK_S -Werte bestimmt. Die erhaltenen Spektren dienen später als Referenz.
- Da NTA im ternären System nicht nur die Radionuklide U und Cm bzw. Eu als dessen nicht-radioaktives Analogon komplexiert, sondern auch Wechselwirkungen mit den anderen zwei- und dreiwertigen Kationen der Zementphase (z. B. Ca^{2+} und Al^{3+}) zeigt, finden 1H -, ^{13}C - und für ausgewählte Proben auch ^{15}N -NMR-Messungen (bei natürlicher Häufigkeit) in Abhängigkeit vom pH-Wert und vom NTA/Metall-Verhältnis statt. Für Eu(III) wurden bereits ein 1:1 und ein 1:2 Eu(III)-NTA-Komplex nachgewiesen.
- Für die thermodynamische Beschreibung und auch für das Struktur-Verständnis ist der (mittels 1H , ^{15}N -HMBC) erbrachte spektroskopische Nachweis wichtig, dass der NTA-Stickstoff bis pH ~ 9.5 protoniert, d. h. in der Ammonium-Form vorliegt.

4. Geplante Weiterarbeiten

Es werden weitere Referenz-Spektren in Abhängigkeit vom pH-Wert und vom NTA/Metall-Verhältnis für U(IV), Ca^{2+} und Al^{3+} aufgenommen; dabei inbegriffen sind auch ^{27}Al -NMR-Spektren. Mit deren Hilfe sollen in den wässrigen Überständen des Zementphase–Organik–Radionuklid-Systems qualitative und quantitative Aussagen zu den NTA-*M*-Komplexen getroffen werden (*M* = Ca, Al, und Eu bzw. U). Die Untersuchungen zur U(VI)- bzw. Eu(III)/Cm(III)-Retention an C-A-S-H-Phasen bei erhöhten Ionenstärken bzw. in Gegenwart von Organika (Gluconat, NTA) werden weitergeführt.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Kretzschmar, J., Tsushima, S., Lucks, C., Jäckel, E., Meyer, R., Steudtner, R., Müller, K., Rossberg, A., Schmeide, K., Brendler, V.: Dimeric and Trimeric Uranyl(VI)–Citrate Complexes in Aqueous Solution. *Inorganic Chemistry* 60, 7998-8010 (2021)

Stockmann, M., Fritsch, K., Bok, F., Marques Fernandes, M., Baeyens, B., Steudtner, R., Müller, K., Nebelung, C., Brendler, V., Stumpf, T., Schmeide, K.: New insights into U(VI) sorption onto montmorillonite from batch sorption and spectroscopic studies at increased ionic strength. *Sci. Total Environ.* 806, 150653 (2022)

Kretzschmar, J., Tsushima, S., Drobot, B., Steudtner, R., Schmeide, K., Brendler, V., Stumpf, T.: Dimeric and Trimeric Uranyl(VI)–Citrate Complexes: ^{17}O -, ^{23}Na -, and ^{139}La -NMR – Helpful Probes for (Super-)Structure Determination. GDCh Jahrestagung der Fachgruppe Magnetische Resonanz (FGMR), 27.09.-01.10.2021, online, Deutschland

Zuwendungsempfänger: Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Hermann-von-Helmholtz-Platz 1, 76344 Eggenstein-Leopoldshafen		Förderkennzeichen: 02 E 11860C
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt C		
Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit Bereich C3: Sicherheitsnachweis, Feld: 3.1		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2020 bis 30.09.2023	Berichtszeitraum: 01.07.2021 bis 31.12.2021	
Gesamtkosten des Vorhabens: 411.017,50 EUR	Projektleiter: Dr. Altmaier	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Thema des Forschungsvorhabens ist die Rückhaltung von Radionukliden (Actiniden) im Nahfeld eines Endlagers für wärmeentwickelnde radioaktive Abfälle in Tonsteinformationen Norddeutschlands gemäß dem Standortmodell NORD. Für den Sicherheitsnachweis eines solchen Endlagers gibt es Wissenslücken, etwa zum Einfluss von organischen und silicatischen Liganden, die aus der Beton- bzw. Zementkorrosion der technischen Barriere resultieren können. Der Einfluss der organischen und silicatischen Liganden auf die Radionuklidrückhaltung soll an Zementkorrosionsphasen und dem Bentonitpuffer unter hyperalkalinen Bedingungen insbesondere bei mittleren bis hohen Ionenstärken quantifiziert werden. Dazu werden die Prozesse Sorption, Komplexierung, Redoxtransformation und Löslichkeit mit experimentellen und ggf. quantenchemischen Methoden studiert, auf molekularer Ebene aufgeklärt und mit thermodynamischen Modellen beschrieben. Auf der Basis der erzielten Ergebnisse soll kritisch bewertet werden, in wieweit vorhandene Befunde für Systeme niedriger Ionenstärke auf die Bedingungen mittlerer bis hoher Ionenstärke gemäß dem Standortmodell NORD anwendbar sind.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

- AP1: Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen und Bentonit unter hyperalkalinen Bedingungen bei mittleren bis hohen Ionenstärken.
- AP2: Wechselwirkung von Actiniden mit organischen und silicatischen Liganden.
- AP3: Nachwuchsförderung im Bereich der nuklearen Entsorgung.
- AP4: Transfer der Erkenntnisse und Integration der Ergebnisse für den Sicherheitsnachweis.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP1: Die synthetisierten CSH-Phasen wurden, zusätzlich zu den bisherigen Methoden, mittels FTIR und TGA und Zetapotentialmessung charakterisiert. Die Sorption von Eu(III) an Bentonit (MX80) und CSH-Phasen in Anwesenheit von Oxalat und EDTA wurde untersucht. Hierbei erfolgt eine Variation der Ionenstärke und -matrix ($I_m = 0.1, 1, 4.5$ m; NaCl, CaCl₂), der Sorptionszeit (7, 50 Tage), und des pH-Wertes (Bentonit, pH = 3-12) bzw. der C/S-Verhältnisse (CSH, C/S = 0.6, 0.83, 1.1, 1.3, 1.4). Die Konzentration der organischen Liganden lag bei $[\text{Oxalat}]_{\text{total}} = 10^{-3}$ m und $[\text{EDTA}]_{\text{total}} = 10^{-4}$ m. In allen Experimenten wurde die Festphase mit dem organischen Liganden voräquilibriert und anschließend das Eu(III) zugegeben. Die vorläufigen Ergebnisse zeigen keinen signifikanten Einfluss der Ionenstärke und -matrix auf die log R_d -Werte. Bezüglich der Sorptionszeit ist kein signifikanter Unterschied der log K_d -Werte für die Sorption von Eu(III) an Bentonit festzustellen. Hingegen ist für die CSH-Phasen eine Erhöhung des Verteilungskoeffizienten nach 50 Tagen festzustellen, verglichen mit der Sorption nach 7 Tagen. Die Variation des pH-Wertes (Bentonit) zeigte eine geringe Sorption im sauren Bereich, während im alkalischen pH-Bereich ein deutlicher Anstieg des log R_d beobachtet wurde. Im Falle der CSH-Phase konnte keine signifikante Änderung der log R_d -Werte bei unterschiedlichen C/S-Verhältnissen beobachtet werden.
- AP2: Nach Umwidmung der Doktorandenstelle in eine PostDoc Stelle wurde Frau Dr. Sarah Duckworth für die Arbeiten in diesem APs mit Vertragsbeginn Januar 2022 gewonnen.
- AP3: Organisation und Teilnahme von Frau Aline Thumm am internen Online-Doktoranden-seminar der im GraZ II-Projekt arbeitenden Doktoranden der jeweiligen Verbundpartner.
- AP4: Es sind hierzu von KIT-INE keine Aktivitäten in frühen Projektphasen geplant.

4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1: Untersuchung der Sorption von Oxalat und EDTA an Bentonit und CSH-Phasen (binäre Systeme) mittels ¹⁴C-markierter Verbindungen, wodurch eine deutlich geringere Nachweisgrenze erreicht werden kann. Batchversuche zur Sorption von Eu(III) an Bentonit und CSH bei unterschiedlichen Konzentrationen an Oxalat und EDTA. Batchversuche zum Einfluss der Reihenfolge der Zugabe der einzelnen Komponenten im ternären System auf die Sorptionsrückhaltung. Hierbei ist ebenfalls ein Langzeitexperiment geplant.
- AP2: (i) Literaturstudie zu den Systemen An(IV/VI)-Silikat und An(IV)-Citrat. (ii) Vorläufige thermodynamische Rechnungen für die An-Silikat und An-Citrat Systeme für alkalischen Bedingungen. (iii) Synthese des Na₂U₂O₇(s,hyd) Festkörpers für Löslichkeitsexperimente im U(VI)-Silikat System. (iv) Start der Löslichkeitsexperimente (aus Untersättigung) im U(VI)-Silikat System. (v) Start von TRLFS Analysen im U(VI)-Silikat System.
- AP3: Das monatliche interne Online-Seminar für Doktorand/innen in GRaZ II wird fortgeführt und entsprechende inhaltliche Beiträge von KIT-INE vorbereitet.
- AP4: Es sind hierzu von KIT-INE keine Aktivitäten in frühen Projektphasen geplant.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Universität des Saarlandes, Campus, 66123 Saarbrücken		Förderkennzeichen: 02 E 11860D
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt D		
Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit Bereich C3: Sicherheitsnachweis, Feld: 3.1		
Laufzeit des Vorhabens: 01.01.2021 bis 30.09.2023	Berichtszeitraum: 01.07.2021 bis 31.12.2021	
Gesamtkosten des Vorhabens: 549.256,50 EUR	Projektleiter: Dr. Kautenburger	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Basierend auf dem Endlagerkonzept NORD innerhalb des FuE-Vorhabens AnSichT sollen im beabsichtigten FuE-Vorhaben relevante Fragestellungen im Rahmen der Langzeitsicherheitsanalyse behandelt werden, die sich insbesondere auf ein mögliches Endlager im norddeutschen Tonstein konzentrieren. Hierbei sollen schwerpunktmäßig solche Parameter untersucht werden, die die geochemische Radionuklidrückhaltung an Zement und Zementalterationsphasen auch in Anwesenheit von Fe(II)/Fe(III) beeinflussen. Es sollen sowohl Immobilisierungs- als auch Remobilisierungsprozesse in Betracht gezogen werden. Als endlagerrelevante Elemente werden U(VI) als Kernbrennstoff bzw. Mo(VI) als ein mögliches homologes Element, Eu(III) als Stellvertreter für die dreiwertigen Actiniden sowie Cs(I), Sr(II), Pd(II), Sm(III), Zr(IV) oder Ru(IV) als mögliche Abbau- bzw. Spaltprodukte, als Strukturteile (z. B. Hüllrohre und Kokillen) oder als nicht radioaktive homologe Stellvertreter für vierwertige Radionuklide als Einzelemente, aber insbesondere als Elementgemisch („WASTE Cocktail“) untersucht werden.

Zu Projektbeginn werden Zementalterationsphasen als solche und zusammen mit organischen Zementzusätzen unter dem Einfluss von hochsalinaren und hyperalkalinen Bedingungen untersucht. Insbesondere werden Calcium-Silikat-Hydratphasen (C-S-H-Phasen) ohne bzw. mit typischen Zementzusätzen, wie beispielsweise 2-Phosphono-butan-1,2,4-tricarbonsäure, kurz PBTC, analysiert. Zu diesen Arbeiten gehören die Charakterisierung der Festphasen sowie die Bestimmung der Rückhaltung ausgewählter Elemente, einzeln und im WASTE Cocktail an C-S-H-Phasen mit Hilfe von Batch-Versuchen bzw. Miniatur-Säulen-Experimenten (MSE). Im weiteren Verlauf der Arbeiten soll nicht nur die Reversibilität der Immobilisierung, sondern auch der Einfluss von Zementzusatzstoffen sowie die Anwesenheit von Fe(II)/Fe(III) und möglichen Konkurrenzreaktionen untersucht werden. Weiterhin ist die Herstellung von Metall-dotierten C-S-H-Phasen und die Untersuchung der Fixierung und Remobilisierung der eingebauten Metalle durch Fe(II)/Fe(III) und möglichen Konkurrenzreaktionen unter hochsalinaren und hyperalkalinen Bedingungen geplant.

Das Forschungsvorhaben erfolgt in Zusammenarbeit mit dem Karlsruher Institut für Technologie, dem Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf und den Universitäten Dresden, Heidelberg, Mainz, München und Potsdam.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Untersuchungen zur Retention von endlagerrelevanten Elementen bzw. Elementgemischen (WASTE Cocktail) an Korrosionsprodukten von Stahlbeton und Zementalterationsphasen unter dem Einfluss von hochsalinaren und hyperalkalinen Bedingungen
- AP2: Untersuchungen zur Retention von ausgewählten endlagerrelevanten Elementen bzw. Elementgemischen an Festphasen unter dem Einfluss von Zementzusätzen unter hochsalinaren und hyperalkalinen Bedingungen
- AP3: Untersuchungen zur Fixierung und Remobilisierung von endlagerrelevanten Elementen bzw. Elementgemischen aus dotierten Festphasen auch unter hochsalinaren und hyperalkalinen Bedingungen
- AP4: Untersuchung zur Remobilisierungskinetik eingebauter Radionuklide aus dotierten Festphasen durch Konkurrenzreaktionen

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im Untersuchungszeitraum wurde die Phasenzusammensetzung selbst hergestellter C-S-H-Phasen mit und ohne Zusatz des Langzeitverzögerers 2-Phosphono-butan-1,2,4-tricarbonsäure (PBTC) mittels Röntgenbeugung (XRD) untersucht. Beide Feststoffe weisen einen hohen Anteil amorpher oder nanokristalliner Strukturen auf, was sich in einem hohen Untergrund und stark verbreiterten Reflexen äußert. Die wenigen sichtbaren, scharfen Reflexe lassen sich den kristallinen Phasen Tobermorit und Xonotlit zuordnen, welche auch bei Untersuchungen der kommerziellen Festphasen Circosil und Circolit beobachtet wurden. Im Gegensatz zu den kommerziellen C-S-H-Phasen beinhalten die selbst hergestellten C-S-H-Phasen mit und ohne PBTC jeweils sowohl Tobermorit als auch Xonotlit.

Mittels semiquantitativer Elementanalyse wurden die auslaugbaren Metalle aus beiden selbst hergestellter C-S-H-Phasen und drei kommerziellen C-S-H-Phasen (Circosil, Circolit und Circomorph) mit 0,1 M NaCl und verdünnter Gipschlösung (VGL) als Equilibrierungsmedium nach 7 und 14 d bestimmt. Im Zuge dieser Untersuchung wurden auch die sich einstellenden pH-Werte im jeweiligen Auslaugmedium nach 7 bzw. 14 d bestimmt und auf Konstanz geprüft. In 0,1 M NaCl Lösung stellen sich je nach verwendeter Festphase pH-Werte von 10,6-11,8 ein. Die berechneten Standardabweichungen liegen bei 0,1 bis auf die selbst hergestellten C-S-H-Phasen mit PBTC-Zusatz, die eine höhere Abweichung von 0,5 aufweisen. In VGL liegen die sich einstellenden pH-Werte im Bereich von 10,2-12,1. Die Standardabweichungen sind ähnlich wie in 0,1 M NaCl.

Auslaugbare Hauptelemente im ppm-Bereich sind aus allen fünf Festphasen Ca(II) und K(I). Als Nebenelement im ppb-Bereich wurde Mg(II) gefunden. Als Spurenelement ist Al(III) in den kommerziellen C-S-H-Phasen zu finden. Bis zu 33 μM Fe(II)/Fe(III) können unter den verwendeten Bedingungen aus den untersuchten Festphasen ausgelaugt werden. Problematisch im Hinblick auf die Bestandteile des erweiterten Waste Cocktails (Cs(I), Eu(III), U(VI), Mo(VI), Pd(II), Sm(III), S(II)r, Zr(IV), Ru(IV)) als potentielle zukünftige Analyten ist das Auslaugen von Zr(IV), welches allerdings nur selten und in kleiner Konzentration (≤ 30 nM) auftritt, aber auch eine deutliche Auslaugung von Sr(II) aus jeder Festphase im mikromolaren Konzentrationsbereich.

Zum Vergleich des Rückhaltevermögens der fünf verschiedenen C-S-H-Phasen wurde in ersten Batch-Experimenten der Rückhalt von Cs(I), U(VI), Mo(VI), Sr(II) und Ru(III) als Elementgemisch an den Festphasen bestimmt. Als Equilibrierungsmedien wurden 0,1 M NaCl und VGL verwendet. Zunächst wurden die Festphasen 7 d mit dem jeweiligen Medium equilibriert. Anschließend wurden je 500 nM der Elemente hinzugegeben und nochmals 7 d equilibriert. Im Anschluss fand eine Phasentrennung statt, wobei der wässrige Teil im Nachgang auf in Lösung verbliebene Elementgehalte mittels Massenspektrometrie mit induktiv gekoppeltem Plasma untersucht wurde.

Der Rückhalt von Cs(I) ist an allen untersuchten Festphasen sehr dynamisch und nicht reproduzierbar, was auf die Konkurrenz mit im Überschuss vorliegenden Na(I) zurückzuführen sein kann. U(VI) und Ru(III) können an allen untersuchten C-S-H-Phasen sehr gut immobilisiert werden (> 90 %). Für Mo(VI) wurde in 0,1 M NaCl ein schwankender, geringer Rückhalt ≤ 30 % beobachtet. In VGL ist kein Rückhalt vorhanden. Sr(II) zeigt, wie bei den Auslaugexperimenten vermutet, keinen nennenswerten Rückhalt an den Festphasen, es wurden sogar bis zu 700 % der eingesetzten Menge zusätzlich ausgelaugt. Eine Unterscheidung zwischen hinzugegebenem Sr(II) und in den Phasen vorhandenem Sr(II) ist nicht möglich.

Als Ergänzung oder Ersatz der selbst hergestellten C-S-H-Phasen soll die stabile, kommerzielle C-S-H-Phase Circosil für weitere Batch-Experimente verwendet werden. Aus diesem Grund wurde eine kinetische Untersuchung des Rückhalts des erweiterten Waste Cocktails an Circosil in 0,1 M NaCl und VGL begonnen.

4. Geplante Weiterarbeiten

Im nächsten Untersuchungszeitraum sollen die Kinetik-Experimente des erweiterten Waste Cocktails an Circosil abgeschlossen werden. Des Weiteren sollen die fünf vorhandenen C-S-H-Phasen auf ihre Eignung für Minisäulenexperimente (MSE) untersucht und geeignete Versuchsbedingungen für diese Experimente mit C-S-H-Phasen als Festphase entwickelt werden. Die Experimente finden bei den sich natürlich einstellenden pH-Werten von ca. 10,0-12,5 statt, wobei bei den MSE durch das dynamische System eine pH-Wert-Änderung nicht auszuschließen ist.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Feuerstein A. (2021): Charakterisierung von C-S-H Phasen und C-S-H-Phasen mit dem Zementadditiv 2-Phosphono-butan-1,2,4-tricarbonsäure unter atmosphärischen Bedingungen. Vertiefungsarbeit Analytik, Naturwissenschaftlich-Technische Fakultät, Universität des Saarlandes

Zuwendungsempfänger: Technische Universität München, Arcisstr. 21, 80333 München		Förderkennzeichen: 02 E 11860E
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt E		
Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit Bereich C3: Sicherheitsnachweis, Feld: 3.1		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2020 bis 30.09.2023	Berichtszeitraum: 01.07.2021 bis 31.12.2021	
Gesamtkosten des Vorhabens: 523.530,00 EUR	Projektleiter: Dr. Krüger	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

- Quantenmechanische Modellierung der Sorption von Actinoiden und Eisen an C-S-H-Phasen
- Quantenmechanische Modellierung der Komplexierung von Actinoiden in basischen Lösungen

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Das Untersuchungsprogramm umfasst folgende Arbeitspakete (AP):

- AP1: Sorption an C-S-H-Phasen
 AP2: Komplexierung von Actinoiden
 AP3: Unterstützung spektroskopischer Experimente

AP1 umfasst periodische Modelle von C-S-H-Festkörpern und -Oberflächen und die Untersuchungen der Wechselwirkung von Actinoiden mit diesen. Weiterhin wird die Sorption von Eisen und ihre Konkurrenz mit Actinoiden untersucht.

In AP2 werden Silikatkomplexe sowie Komplexe mit Lösungskationen der Actinoiden in wässriger Lösung untersucht.

AP3 ist der Unterstützung der Interpretation spektroskopischer Experimente im Verbund durch entsprechende quantenmechanische Modellierungen im Bedarfsfall gewidmet.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1.1: Modelle; AP1.3: Sorption an (001)-Oberfläche; AP1.5: Sorption und Konkurrenz FE

Das Tobermoritmodell für CSH für $C/S = 1$ wurde verbessert (AP1.1). Systematische Rechnungen ausgehend von deprotonierten und teilweise protonierten SiOH-Gruppen bestätigen eine teilweise Hydrolyse der Ca-Ionen in der Zwischenschicht, die mit der Existenz von protonierten SiOH-Gruppen einhergeht, und lieferten ein stabileres Referenzmodell.

Die Untersuchung des Sorptionsmechanismus von Actinoiden an C-S-H-Phasen wurde mit Modellierungen der Adsorption von U(IV) an der (001)-Oberfläche von Tobermoritmodellen fortgesetzt (AP1.3). Für ein Tobermoritmodell mit $C/S = 1$ und Defekten (SiO₄-Kettenfehlstellen) wurden ergänzend zur Sorption im Austausch mit Protonen auch die Sorption im Austausch

gegen Ca^{2+} und Protonen modelliert, um direkt mit der Sorption in der Zwischenschicht vergleichen zu können. Dabei wurden gleiche Spezies mit ähnlichen relativen Energien gefunden, jedoch auch eine bidentate Spezies, die bisher nur für $C/S = 0.67$ erhalten wurde. Nach fehlenden bidentaten Spezies wird noch gesucht. Der Vergleich von Energien zeigt, dass U(IV) an bevorzugten Plätzen an der Oberfläche etwas stärker bindet als in der Zwischenschicht. Damit ist die Adsorption von U(IV) für dieses Beispiel nur geringfügig schwächer als der bevorzugte Einbau in die CaO-Schicht. Der Vergleich mit U(VI) zeigt einen Trend zunehmender Sorptionsenergien mit der Koordinationszahl (CN) an die Oberfläche. Abweichungen von diesem Trend für U(VI) konnten an Beispielen durch bessere Optimierungen verringert werden. Diese Untersuchungen werden derzeit auf ein Oberflächenmodell ohne Defekte erweitert, um die erhaltenen Befunde zu erhärten.

Die Untersuchung der Sorption von Eisen in CSH-Phasen (AP1.5) wurde fortgeführt. Für ein Tobermoritmodell mit $C/S = 0.67$ wurden bisher gefundene Plätze für die Sorption von Fe(II) in der Zwischenschicht besser optimiert und um zwei weitere Plätze ergänzt. Es wurden bisher teils mehrere schichtverbrückende, bidentate, kettenverbrückende und Plätze an Defekten gefunden. Sechs dieser Plätze unterscheiden sich in der Energie nur um etwa 30 kJ/mol. Damit erscheinen für Fe(II) verschiedene Sorptionsplätze mit CN zwischen 4 und 6 möglich, wobei mittlere Fe-O-Abstände für CN = 4 und 5 mit dem Experiment kompatibel sind. Bevorzugt sind schichtverbrückende sowie ein monodentater Platz an einem Defekt.

Die Substitution von bis zu vier Fe(II) in einem Tobermoritmodell mit $C/S = 0.83$ mit Ca^{2+} -Zwischenschichtionen wurde untersucht, um nach gemessenen kurzen Fe-Ca-Abständen zu suchen, die im Modell mit $C/S = 0.67$ nicht gefunden wurden sowie um eine Vergrößerung des Schichtabstands im Experiment bei CSH-Koprezipitation mit Fe(II) zu verifizieren. Fe(II) wurde sowohl in der Zwischenschicht als auch in der CaO-Schicht substituiert, wobei die Konzentration von vier Fe(II)-Substitutionen dem Experiment entspricht. Mit dem Experiment vergleichbare Fe-Ca-Abstände wurden nicht gefunden. Auch eine merkliche Vergrößerung des Schichtabstands wird bei beiden Substitutionsmoden nicht beobachtet. Für Fe(II) in der Zwischenschicht ergibt sich eine Kontraktion um etwa 1.5 %, während bei Einbau in die CaO-Schicht eine Expansion um lediglich 0.6 % erhalten wird. Energien zeigen, dass die Substitution in der Zwischenschicht gegenüber dem Einbau in die CaO-Schicht bevorzugt ist. Damit erscheint ein Einbau in die CaO-Schicht als unwahrscheinlich und stellt wohl auch keine Konkurrenz zur entsprechenden Sorptionsmode von Actinoiden(III/IV) dar.

Mit der Modellierung von Fe(II) in der Zwischenschicht eines Tobermoritmodells mit $C/S = 1$ wurde begonnen, insbesondere um die Möglichkeit relativ kurzer Fe-Ca-Abstände weiter auszuloten. Bisher werden schicht- und kettenverbrückende Plätze untersucht.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP1.1: Modelle
 AP1.3: Sorption an (001)-Oberfläche
 AP1.5: Sorption und Konkurrenz Fe
 AP2.1: Monosilikatkomplexe

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Universität Potsdam, Am Neuen Palais 10, 14469 Potsdam		Förderkennzeichen: 02 E 11860F
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt F		
Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit Bereich C3: Sicherheitsnachweis, Feld: 3.1		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2020 bis 30.09.2023	Berichtszeitraum: 01.07.2021 bis 31.12.2021	
Gesamtkosten des Vorhabens: 482.418,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Kumke	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

An der Universität Potsdam (Physikalische Chemie) werden besonders Laser-basierte optische Methoden zur Untersuchung der in den Verbund-Arbeitspakete AP1 und AP2 definierten Fragestellungen eingesetzt und (weiter)entwickelt. Die methodischen Entwicklungen analytischer, optischer Methoden und die systematischen Untersuchungen haben die Verbesserung des molekularen Prozessverständnisses der Wechselwirkungen von Actinoid-Ionen (bzw. Lanthanoid-Ionen als Analoga) mit Zementalterationsphasen oder Bentonit unter hyperalkalinen Bedingungen (AP1) sowie silicatischen Ligandensystemen (AP2) zum Ziel. Das Vorhaben wird in dem 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

In dem Verbundprojekt wird die Rückhaltung von Radionukliden an Zementalterationsphasen und Bentonit unter geochemischen Bedingungen, die für die Tonformationen in Norddeutschland relevant sind (Standortmodell NORD), untersucht.

Das Verbundprojekt enthält vier Arbeitspakete (AP):

- AP1: Radionuklid-Rückhaltung an Zementalterationsphasen und Bentonit unter hyperalkalinen Bedingungen bei mittleren bis hohen Ionenstärken
- AP2: Wechselwirkung von Actiniden mit organischen und silicatischen Ligandensystemen
- AP3: Nachwuchsförderung im Bereich der nuklearen Entsorgung
- AP4: Transfer der Erkenntnisse und Integration der Ergebnisse für den Sicherheitsnachweis

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

In AP1 wurde die Herstellung der CSH-Templatphasen auf Basis von SiO₂- und CaO-Nanopartikeln fortgesetzt (C/S-Verhältnis 1,3 und 0,8; I = 2,6 M). Eu(III) wurde als optische Sonde eingesetzt und mittels TRLFS (Raumtemperatur und bei T = 5 K) untersucht. Es wurden ternäre Systeme „CSH+Eu(III)+Organik“ untersucht bei 9 < pH < 12,5. Als „Organik“ wurden Gluconat, NTA und Phthalsäure (Kooperation mit TU DD) eingesetzt. Als Referenz wurden zusätzlich binäre Systeme „Eu(III) + Organik“ bei verschiedenen pH-Werten untersucht, um so die Da-

ten der ternären Systeme zu flankieren, indem für die Komplexe in Lösung die spektroskopischen Parametersets bestimmt wurden. Die Arbeiten zur Komplexierung von Ln(III) durch Kieselsäure(n) unter Verwendung von TRLFS in AP2 wurden weitergeführt. Die Auswertung der TRLFS-Daten (AP1, AP2) erfolgte mit Matlab und dem PARAFAC-Algorithmus, wodurch die spektroskopische Identifikation verschiedenen Eu(III)-Spezies (sorbiert oder in Lösung) gelingt. Für die Untersuchungen in AP1 wurden so in Kombination mit der Sorptionszeit Spezies-selektive Kinetiken für die An- und Einlagerung von Eu(III) in Verbindung mit CSH-Phasen erhalten. Für $C/S = 1,3$ ist die Auswertung fast abgeschlossen. Für die Systeme mit $C/S = 0,8$ enden die Sorptionsexperimente Ende Januar 2022. Weiterhin wurde die elektrochemische Messzelle/Küvette für die Transienten-Absorptionsspektroskopie (TAS) mittels Referenzexperimenten charakterisiert. Durch Variation des Redoxpotential der Lösung (Anlegen einer externen Spannung) wurde der Wechsel der Oxidationsstufe Fe(II)/Fe(III) für einen Modellkomplex mittels TAS verfolgt. In Kooperation mit Kolleg:innen vom HZDR konnten erste TAS-Messungen mit U(IV)-Verbindungen durchgeführt werden. Das monatlich stattfindendes Doktoranden und Post-Doc-Seminar ist etabliert.

4. Geplante Weiterarbeiten

Die Experimente mit „Nano“CSH-Templatphasen (SiNP und CaO als Nanomaterial) werden unter Variation von Systemparametern (z. B. Ionenstärke, C/S , S/L) fortgeführt. Der Einfluss von Organik (z. B. Gluconat, NTA) auf die Sorption/Inkorporation von Eu(III) an/in CSH-Phasen wird unter den variierten Systemparameter weiter untersucht. Schwerpunkt werden weiterhin TRLFS-Untersuchungen in Kombination mit einer PARAFAC-Auswertung sein, ergänzt um weitere Charakterisierungsmethoden (XRD, SEM für CSH-Phasen, ICP-OES für $[Eu(III)]_{ges}$ im Überstand usw.). Die nach PARAFAC-Analyse erhaltenen Spezies-aufgelösten Sorptionskinetiken werden modelliert (s. o., Ende Januar 2022 wird mit der Analyse der Daten für $C/S=0,8$ begonnen). Als Metadaten werden so die C/S -bezogenen Spezies-selektiven Parameter der Sorptionskinetik erhalten werden. Es werden Desorptionsuntersuchungen begonnen, in dem CSH-Phasen in Anwesenheit von Eu(III) hergestellt und anschließend mit Organik (s. o.) in der flüssigen Phase versetzt werden. Die TRLFS-Untersuchungen unter Nutzung von Yb(III) als Lumineszenzsonde in Fe-haltigen Festphasen werden fortgeführt. Die Arbeiten zur Komplexierung von Eu(III) durch Kieselsäure(n) werden für höhere pH-Werte fortgesetzt (AP2). Die Untersuchung höhere Kieselsäure-Konzentrationsbereiche wird erweitert mit der Zielsetzung, die Bildung von Polykieselsäuren (bzw. Kolloiden) zu charakterisieren. In diesem Zusammenhang soll auch der mögliche Alterungseinfluss betrachtet werden. Die Arbeiten zum PBTC werden in Kooperation mit der TU Dresden fortgesetzt. Die Arbeiten zur Kombination von TAS und Spektroelektrochemie werden fortgeführt. Neben Fe(II)/Fe(III)-Verbindungen erfolgen Untersuchungen zur Redoxumwandlung von U(IV)/U(VI) mittels Transienten-Absorptionsspektroskopie.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Masterarbeit von Frau Sophie Dettmann „Lumineszenzbasierte Speziation von Eu(III) an Zementalterationsphasen in Gegenwart von organischen Komplexbildnern“, Potsdam, Januar 2022

Zuwendungsempfänger: Technische Universität Dresden, Helmholtzstr.10, 01069 Dresden		Förderkennzeichen: 02 E 11860G
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt G		
Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit Bereich C3: Sicherheitsnachweis, Feld: 3.1		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2020 bis 30.09.2023	Berichtszeitraum: 01.07.2021 bis 31.12.2021	
Gesamtkosten des Vorhabens: 374.721,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Stumpf	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

In dem Verbundvorhaben wird die Rückhaltung von Radionukliden an Zementalterationsphasen und Bentonit unter geochemischen Bedingungen, die für die Tonformationen in Norddeutschland relevant sind untersucht. Ziel ist die Aufklärung des geochemischen Verhaltens von Actiniden an/in Zementalterationsphasen und Bentonit unter dem Einfluss von Fe(II) und niedermolekularer organischer Liganden und Zementadditiven, die Erarbeitung grundlegender Erkenntnisse zur Wechselwirkung von Actiniden mit silikatischen und organischen Liganden bei mittleren bis hohen Ionenstärken und unter hyperalkalinen Bedingungen, die Nachwuchsförderung im Bereich nukleare Entsorgung sowie der Transfer und die Integration der Ergebnisse für einen Sicherheitsnachweis. Die Arbeiten dieses Teilprojektes beschäftigen sich mit dem Einfluss des von PBTC (2-Phosphanobutan-1,2,4-tricarboxylsäure), das in der Herstellung von Zement verwendet wird und während der Betondegradation freigesetzt werden kann, auf die Speziation von Actiniden im System SiO_2 /(Polysilikat)-Actinid-Organik unter endlagerrelevanten Bedingungen. Es sollen konsistente thermodynamische Standarddaten zur Komplexierung von PBTC mit Actiniden über SIT-Modellierung bestimmt sowie der Einfluss von PBTC auf die Wechselwirkung von Actiniden in silikathaltigen Lösungen charakterisiert werden. Das Projekt liefert einen wichtigen Beitrag für eine thermodynamisch fundierte Langzeitsicherheitsanalyse von nuklearen Endlagern. 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

Die Arbeiten dieses Projektes sind im Wesentlichen in das Verbundarbeitspaket AP2 „Wechselwirkung von Actiniden mit organischen und silikatischen Liganden“ angesiedelt.

AP-TU1: Untersuchungen zur Wechselwirkung von redoxstabilen Actiniden verschiedener Oxydationsstufen mit PBTC. Dieses AP beinhaltet die thermodynamische Charakterisierung der Protonierung des PBTC-Liganden, die ausführliche thermodynamische und strukturelle Charakterisierung der Komplexierung der Actinide (u. a. Am(III), Cm(III), Pu(III), Th(IV), U(VI), ggf. inaktive Analoga Eu(III), Nd(III)) mit dem PBTC-Liganden im sauren und alkalischen pH-Bereich als Funktion der Ionenstärke an NaCl und CaCl_2 sowie Untersuchungen zum Einfluss von Konkurrenzmetallionen (z. B. Fe^{2+}) auf die Komplexierung. Hauptaugenmerk liegt auf der Charakterisierung möglicher ternärer Komplexe. Entsprechende thermodynamische Standarddaten zur Komplexbildung ($\log_{10}\beta_{n,m}^0$, $\Delta_r H_m^0$, $\epsilon_{j,k}$) werden aus SIT-Modellierungen abgeleitet.

AP-TU1: Untersuchungen zum Einfluss von Zementadditiven auf die Wechselwirkung von redoxstabilen Actiniden/ Lanthaniden in silikatischen Lösungen. In diesem AP wird der Einfluss von relevanten Liganden (Citrat, PBTC, Gluconat) auf die Eigenschaften von silikatischen Lösungen/Suspensionen bezüglich ihrer Speziation und daraus abgeleitet auf die Wechselwirkungen mit Actiniden untersucht.

Geplant sind Batchsorptionsuntersuchungen mit Actiniden in gut charakterisierten (Poly)silicat-Ligand-Suspensionen. Die Sorptionsisothermen und Verteilungskoeffizienten (K_d -Werte) sollen als Funktion der Ionenstärke (bis 3 m NaCl, CaCl_2) und des pH-Wertes bestimmt werden.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP-TU1a)

1) Mittels ^1H -, ^{13}C -, und ^{31}P -NMR wurden folgende Protonierungskonstanten (pKs-Werte) von PBTC bei einer definierten Ionenstärke von 0,5 m NaCl bestimmt: pKs₁₋₅ 0,9 / 3,9 / 4,7 / 6,1 / 9,8. Weiterhin konnte mit Hilfe der NMR-Daten und DFT-Kalkulationen eine Zuordnung des jeweiligen pKs-Wertes zu der entsprechenden funktionellen Gruppe erfolgen.

2) Für spektroskopische Untersuchungen mit An/Ln ist eine Aufreinigung des technischen PBTC-Produktes notwendig. Hierzu wurden diverse Versuche mittels eines HPLC Agilent 1200 Systemes mit einer Zorbax Eyclipse XDB – C18, 5 μm , 4,6 x 150 mm Säule und einem Diodenarray-Detektor (DAD, G1315B) bei einer konstanten Säulentemperatur von 25 °C durchgeführt. Die Probe (5 μl Injektionsvolumen) wurde bei konstanter Flussrate von 0,8 ml/min mit 1 mM HCl-Lösung (pH 3, Lösungsmittel A) und Acetonitril (Lösungsmittel B) unter Verwendung der folgenden Lösungsmittelgradientenmethode eluiert. Lösungsmittel B wurde innerhalb von 20 min von 20 % auf 60 % erhöht, in der darauffolgenden Sekunde wurde Lösungsmittel B auf 100 % gebracht und in diesem Lösungsmittelverhältnis weitere 15 min belassen. Das Chromatogramm zeigt deutlich voneinander abgetrennte Signale. Eine Auftrennung im quantitativen Maßstab ist im nächsten Berichtszeitraum vorgesehen.

AP-TU1b)

1) Die Charakterisierung der U(VI)-PBTC-Komplexierung erfolgte mittels cryo-TRLFS im pH-Bereich zwischen 2 und 11 bei unterschiedlichen Metall-Ligand-Verhältnissen und einer Ionenstärke von 0,5 m NaCl. Die Auswertung der TRLFS-Datensätze mittels Paralleler Faktoranalyse ist noch nicht abgeschlossen, ggf. müssen Messungen wiederholt werden, da bisher keine eindeutigen Aussagen zur Anzahl der Komplexspezies ab pH = 4 getroffen werden können. Wahrscheinlich wird die Bildung weiterer Komplexspezies bei höheren pH-Werten kinetisch beeinflusst.

2) Zur Bestimmung der Molekülstruktur der gebildeten U(VI)-PBTC-Komplexe wurden umfangreiche ein- und mehrdimensionale NMR-Experimente (in deuteriertem Wasser, D_2O) durchgeführt. Hierfür wurden Lösungen im pD-Bereich von 2 bis 11 für drei verschiedene U(VI):PBTC Verhältnisse (1:0.5; 1:1; 1:5) hergestellt. Die untersuchten Kerne umfassten dabei ^1H -, ^{13}C -, und ^{31}P für die Betrachtung des Liganden PBTC sowie für ausgewählte Proben ^{17}O (bei natürlicher Häufigkeit) zur Beobachtung des Uranyl-Ions. Die Resonanzen der einzelnen Atome, die sich in Abhängigkeit vom pH-Wert und U(VI):PBTC-Verhältnis ändern, wurden anhand von ^1H , ^1H - (COSY, TOCSY, ROESY) sowie ^1H , ^{13}C - und ^1H , ^{31}P -Korrelationsexperimenten (HSQC, HMBC) zweifelsfrei zugeordnet. Zudem wurden auch die skalaren ^1H , ^1H - und ^{31}P , ^1H -Kopplungskonstanten zur Charakterisierung der Molekülkonformation herangezogen. Durch Temperaturvariation (Abkühlung bis auf -1 °C bzw. Erwärmen auf $+70$ °C) konnten dynamische Prozesse wie z. B. Ligandaustauschreaktionen beeinflusst und mithilfe der zweidimensionalen Austauschspektroskopie (EXSY) qualitativ nachgewiesen werden. Aufgrund der außerordentlichen Datenmenge ist die Auswertung noch nicht abgeschlossen. Vorläufig können folgende allgemeine Aussagen getroffen werden: a) PBTC bildet mit Uran(VI) bis in den alkalischen Bereich Komplexverbindungen, b) Die Phosphonatgruppe ist, unabhängig von den Probenbedingungen, an der Uran(VI)-Komplexierung beteiligt, c) Der Ligandaustausch beschleunigt sich mit abnehmendem pH-Wert.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Die NMR-Ergebnisse zur Protonierung von PBTC sollen in einem Manuskript für die Veröffentlichung in einer NMR-Fachzeitschrift zusammengefasst werden.
- Fortsetzung der Datenauswertung der bisherigen NMR-spektroskopischen Untersuchungen zur U(VI)-PBTC-Komplexierung. Ggf. werden die NMR-Messungen bei verschiedenen Temperaturen fortgesetzt, um Geschwindigkeitskonstanten und die damit verknüpften Aktivierungsparameter der Ligandaustauschreaktion zu bestimmen. Mithilfe optischer Rotationsdispersion soll festgestellt werden, ob kommerziell verfügbare PBTC selbst als Racemat vorliegt oder einen Enantiomerenüberschuss aufweist, und folglich einige der gebildeten U(VI)-Komplexe unterscheidbare Diastereomere bilden.
- Fortsetzung der TRLFS- und UV-Vis-Untersuchungen sowie der mikro-titrationskalorimetrischen Messungen zur spektroskopischen und thermodynamischen Charakterisierung von U(VI)-PBTC und Eu(III)-PBTC-Komplexen.
- Aufreinigung des kommerziellen PBTC mittels präparativer HPLC.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Universität Heidelberg, Grabengasse 1, 69117 Heidelberg		Förderkennzeichen: 02 E 11860H
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt H		
Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit Bereich C3: Sicherheitsnachweis, Feld: 3.1		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2020 bis 30.09.2023	Berichtszeitraum: 01.07.2021 bis 31.12.2021	
Gesamtkosten des Vorhabens: 403.292,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Panak	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Thema des Forschungsvorhabens ist die Rückhaltung von Radionukliden (Actiniden) im Nahfeld eines Endlagers für Wärme entwickelnde radioaktive Abfälle in Tonsteinformationen gemäß dem „Standortmodell NORD“. Für den Sicherheitsnachweis eines solchen Endlagers gibt es Wissenslücken zum Einfluss von gelöstem Eisen, das bei der Korrosion der Einlagerungsbehälter freigesetzt wird sowie von organischen und silicatischen Liganden, die aus der Beton- bzw. Zementkorrosion der technischen Barriere resultieren. Deshalb soll der Einfluss von Eisen sowie der organischen und silicatischen Liganden auf die Radionuklidrückhaltung an Zementkorrosionsphasen und dem Bentonitpuffer unter hyperalkalinen Bedingungen bei mittleren bis hohen Ionenstärken quantifiziert werden. Dazu werden die Prozesse Sorption, Diffusion, Komplexierung, Redoxtransformation und Löslichkeit mit experimentellen und quantenchemischen Methoden untersucht und mithilfe von thermodynamischen Modellen beschrieben. Die zu erwartenden wissenschaftlichen Ergebnisse werden den grundlegenden Kenntnisstand auf dem Gebiet der geochemischen Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen deutlich erweitern und tragen damit direkt zur Optimierung einer thermodynamisch fundierten Sicherheitsanalyse zur Langzeitsicherheit von nuklearen Endlagern bei. Des Weiteren werden wichtige grundlegende Erkenntnisse bezüglich des Komplexierungsverhaltens von Actiniden erhalten, die auch in anderen wissenschaftlichen Bereichen von besonderer Bedeutung sind.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP2.1: Komplexierung von Actiniden mit ausgewählten organischen Referenzliganden
- AP2.2: Komplexierung von Actiniden mit ausgewählten Zementadditiven
- AP2.3: Wechselwirkung von Actiniden mit silicatischen Systemen: Speziation und Thermodynamik
- AP3: Nachwuchsförderung im Bereich der nuklearen Entsorgung
- AP4: Transfer der Erkenntnisse und Integration der Ergebnisse für den Sicherheitsnachweis

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im Rahmen von AP2.3 wurden zunächst grundlegenden colorimetrische Untersuchungen zur Polymerisation von Silicaten in wässriger Lösung mit unterschiedlichen Konzentrationen ($c_{\text{SiO}_2} = 10^{-2}$ bis 10^{-5} M) im pH-Bereich von 2-10 durchgeführt. Dabei wurden niedrige bzw. hohe Ionenstärken ($I_{\text{NaCl}} = 0.4$ M bzw. 5.0 M, $I_{\text{NaCl}} = 0.5$ M und 17.5 M) verwendet. Die colorimetrische Speziation basiert darauf, dass nur niedermolekulare Silicate mit Ammoniummolybdat unter reduktiven Bedingungen einen blauen Komplex bilden (Heteropoly-Blau-Methode). Da die Einstellung des thermodynamischen Gleichgewichts sehr langsam erfolgt, wurde die Alteration der Probelösungen über einen Zeitraum von mehreren Wochen untersucht. Ergänzend wurden thermodynamische Rechnungen (DFT) der Silicat-kondensationsreaktion durchgeführt. Nachdem mit Hilfe der SiO_2 -ICP-Standardlösung (pH = 13.7) der Extinktionskoeffizient mit $\epsilon_{823 \text{ nm}} = 18438 \text{ M}^{-1} \times \text{cm}^{-1}$ ermittelt wurde, konnte der Gehalt an Polysilicaten in den Probelösungen bestimmt werden. Es zeigte sich, dass die Silicate überwiegend polymer vorliegen, und nur in stark verdünnter Lösung mit niedriger Ionenstärke ein signifikanter Anteil (ca. 20-60 %) an Monosilicat nachgewiesen werden konnte. Dabei sind die Ergebnisse für NaCl und CaCl_2 identisch. Diese Ergebnisse werden durch die durchgeführten quantenchemischen Berechnungen bestätigt, die ebenfalls eine (leichte) thermodynamische Präferenz für die Polymerbildung (Kondensation) bei Silikaten vorhersagen. Eine Ausnahme bildet hier der stark alkalische Bereich in dem das Silicat ausschließlich als Monomer vorzuliegen scheint.

In einem weiteren Schritt wurden, in Ergänzung zu den Vorarbeiten von Panak et al., die Komplexierung von Cm(III) mit Silicaten mittels zeitaufgelöster Laserfluoreszenzspektroskopie (TRLFS) untersucht. Hierbei wurden wässrige Silicatlösungen unterschiedlicher Konzentration ($c_{\text{SiO}_2} = 10^{-2}$ bis 10^{-5} M) bei konstanten niedrigen und hohen Ionenstärken (I_{NaCl} bis 5.0 M) verwendet. Der pH-Wert wurde im Bereich von 2-14 variiert, wobei alle Proben in einer Inertgasbox (mit Argon Schutzatmosphäre) präpariert wurden. Ein Equilibrierungszeitraum von 24 h wurde eingehalten. Ergänzend wurden quantenchemische Berechnungen verschiedener Cm-Silicat-Komplexe durchgeführt. Die hier erhaltenen Ergebnisse bestätigen in Übereinstimmung mit der Literatur, dass für die Speziation des Cm(III) mittels TRLFS auch bei niedriger Silicatkonzentrationen (10^{-5} M) polymere und kolloidale Spezies neben einer niedermolekularen Cm-Silicatspezies berücksichtigt werden müssen. Ziel weiterer Untersuchungen ist es, der Frage nachzugehen, ob diese Spezies in der Lage sind, die im alkalischen Bereich auftretende Hydrolyse des Curiums teilweise zu unterdrücken.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Validierung, Quantifizierung und Weiterführung der Untersuchungen zur Polymerisation von Silikatlösungen und zur Komplexierung der verschiedenen Silicatspezies mit Cm(III)
- Quantenchemische Untersuchungen einfacher Cm-Silicat Komplexe
- Untersuchungen zur Komplexierung von Cm(III) mit organischen Liganden/Carbonaten
- Ausweitung der Studien zur Wechselwirkung von An(III)/Ln(III) mit polymeren Polycarboxylat-Superplasticizern auf den neutralen bis alkalischen Bereich

5. Berichte, Veröffentlichungen

Vertiefungspraktikum – Bericht: Komplexierung von Cm(III) mit Kieselsäure in wässriger Lösung (Manuela Brock)

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 11870A
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt A		
Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte, Feld: 2.3		
Laufzeit des Vorhabens: 01.01.2021 bis 31.12.2023	Berichtszeitraum: 01.07.2021 bis 31.12.2021	
Gesamtkosten des Vorhabens: 963.287,72 EUR	Projektleiter: Dr. Melesyhn	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Die Ziele des Verbundvorhabens sind: 1. Aufklärung des Mechanismus der Zersetzung von Karbonaten und CO₂-Freisetzung in Bentoniten, 2. Bestimmung der Gründe für die beobachtete Acidität der Bentonite bei erhöhten Temperaturen, 3. Beitrag zur Aufklärung des Lösungs- bzw. Umwandlungsmechanismus der Smektite in Bentoniten, 4. Beitrag zur Aufklärung der Metallkorrosion durch Wechselwirkung mit Bentoniten mit/ohne mikrobiellen Einfluss unter Einsatz von optimierter Mössbauerspektroskopie, 5. Mechanistisches Verständnis der Fe(II)/Fe(III)-Redoxreaktion strukturellen Eisens in Smektiten auf atomarem Niveau mit Hilfe von quantenchemischen Modellierungen.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Zum Erreichen der oben genannten Ziele sind aufeinander abgestimmte experimentelle und analytische Arbeiten in den Laboren der Verbundprojektpartner sowie quantenchemische Modellierungen und geochemische Modellierung vorgesehen.

Im AP1 „Zersetzung von Karbonaten und CO₂-Freisetzung“ (Federführung: GRS) sollen dafür im GRS-Labor Versuche mit Bentoniten, reinen Mineralphasen und aus diesen hergestellten Mineralgemischen in Metallzylindern bei 120 °C sowie anschließende Gasanalysen und Bestimmungen der Karbonatgehalte, pH-Werte und Zusammensetzungen der Kontaktlösungen durchgeführt werden. Die Versuche und ihre Auswertung sollen durch die unterstützende geochemische Modellierung begleitet werden.

Im AP6 koordiniert die GRS die Arbeiten im Verbundprojekt.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im Berichtszeitraum wurden aufgrund des Mutterschutzes und der Elternzeit der Projektlabor-mitarbeiterin lediglich zwei Versuchsreihen zur Ermittlung des optimalen Feststoff-Flüssig-Verhältnisses und zur Herstellung der Bentonitproben für Beamline-Computertomographie ge-startet. Eine Abstimmung der Versuchsdurchführung im AP1 erfolgte mit BGR/UG bzw. LUH-IfBK.

Die Koordination des Verbundprojektes bestand in der Organisation des zweiten Videokonfe-renzworkshops sowie der dabei als notwendig identifizierten Abstimmungen, dem Abschluss des Kooperationsvertrages und der Vorbereitung des dritten, am 10. März 2022 auszurichten-ten Workshops.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Abschluss der zwei gestarteten Versuchsreihen, Vorbereitungen und Beginn der weiteren Versuchsreihen im AP1
- Abschluss des Kooperationsvertrags, Organisation des dritten Projektworkshops im AP6.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e. V., Bautzner Landstr. 400, 01328 Dresden		Förderkennzeichen: 02 E 11870B
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt B		
Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte, Feld: 2.3		
Laufzeit des Vorhabens: 01.01.2021 bis 31.12.2023	Berichtszeitraum: 01.07.2021 bis 31.12.2021	
Gesamtkosten des Vorhabens: 359.046,00 EUR	Projektleiter: Dr. Matschiavelli	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Bentonit-basierte Nahfeldbarrieren können in einem Endlager für hoch-radioaktive Abfälle aufgrund erhöhter Temperaturen und einer Wechselwirkung mit wässrigen Lösungen aus dem umliegenden Wirtsgestein eine für die Langzeitsicherheit des Endlagers relevante Umwandlung erfahren. Im Projekt UMB wurde festgestellt, dass bei 25, 90 und 120 °C eine erhebliche pH-Absenkung sowie eine CO₂-Gasbildung durch eine teilweise bis vollständige Zersetzung der in Bentoniten vorhandenen Karbonate ablaufen kann. Im Projekt UMB-II sollen die beteiligten Reaktionsmechanismen aufgeklärt werden. Weitere Arbeitsschwerpunkte sind (i) die Abhängigkeit der Lösungsrate der Smektite vom Bentonit-Typ, (ii) der Einfluss der Fe(II)/Fe(III)-Redoxreaktion (experimenteller und quantenchemischer Ansatz), (iii) die Unterschiede in Korrosionsraten und -produkten an einer Eisen-Bentonit-Grenzfläche (mit Einsatz einer zu optimierenden Mössbauerspektroskopie) und (iv) der Einfluss der Bentonit-eigenen mikrobiellen Population. Die unter (iv) genannten mikrobiellen Arbeiten werden am HZDR durchgeführt. Hierzu werden Mikrokosmen angesetzt, welche mit einem Bentonit (B27 oder GMZ), synthetischer Opalinuston-Porenlösung (OPA) und Gusseisenplättchen (Typ GGG40) versehen werden. Die Ansätze inkubieren für mindestens ein Jahr jeweils bei 37 und 90 °C mit und ohne Zugabe von Wasserstoff.

Innerhalb der Kooperationspartner (Förderkennzeichen 02E11870)

Leibniz Universität Hannover, Institut für anorganische Chemie; Leibniz Universität Hannover, Institut für Bodenkunde; Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Bereich Endlagerforschung, Braunschweig; Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR), Arbeitsbereich Technische Mineralogie, Hannover; Ernst-Moritz-Arndt-Universität Greifswald, Institut für Geographie und Geologie, Greifswald; Technische Universität München, Lehrstuhl für theoretische Chemie

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Die Thematik des UMB-II Projektes wird in 6 Arbeitspaketen (AP) bearbeitet, wobei das HZDR an der Bearbeitung des AP4 „Metallkorrosion in Bentoniten mit/ohne mikrobiellen Einfluss“ beteiligt ist.

- Ansetzen und Beprobieren von Mikrokosmen über einen Zeitraum von Mindestens 12 Monaten
- Bestimmung bio-geochemischer Parameter (z. B. pH-Wert, E_h, Fe(II/III)) in Mikrokosmen
- Extraktion von DNA aus inkubierten Mikrokosmen und Bentonit-Ausgangsmaterialien
- Bestimmung mikrobieller Diversität (PCR, RISA, Sequenz-Analyse)
- Mikroskopische Analyse der Gusseisen-Korrosion mittels SEM-EDX
- Ggf. Anreicherung von Mikroorganismen aus inkubierten Mikrokosmen

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Am HZDR wird der Einfluss der in den Bentoniten B27 und GMZ-001 enthaltenen mikrobiellen Population auf die Korrosion von Gusseisenplättchen (Typ GGG40) analysiert. Mikrokosmen, welche einen der jeweiligen Bentonite, GGG40-Plättchen und synthetische, anaerobe Opalinuston-Porenlösung enthalten, sollen für diese Analysen genutzt werden um so ein „Worst-Case-Szenario“ durch einen Wassereinbruch nachzustellen. Für die Simulation einer beginnenden Korrosion, werden einige Ansätze mit Wasserstoff versehen. Kontrollansätze beinhalten zweifach autoklavierten Bentonit. Die Mikrokosmen inkubieren bei 30 und 70 °C, um so einen relevanten Temperaturgradienten in einem Endlager nachzustellen.

Innerhalb des zweiten Bericht-Zeitraums konnten die 224 Mikrokosmen erfolgreich angesetzt und erstmalig beprobt werden. So konnten die Ausgangsbedingungen – die sogenannten „t₀-Werte“ – in den entsprechenden Ansätzen unter den jeweiligen Bedingungen ermittelt werden. Diese dienen im weiteren Verlauf des Experiments als Referenz und markieren den Ausgangspunkt für alle weiteren Veränderungen der unterschiedlichen Parameter über den zeitlichen Verlauf des Experiments.

Alle t₀-Proben zeigten ausnahmslos ein sehr negatives Redoxpotential, welches zwischen -200 und -400 mV liegt. Die 2-monatige anaerobe Lagerung der beiden Bentonite, vor dem Ansetzen der Experimente, war somit erfolgreich. Der pH-Wert der B27-Ansätze liegt durchschnittlich bei 7,4 verglichen zu 7,1 bei den GMZ-001-Ansätzen. Ein Einfluss der Temperatur auf E_h und pH lässt sich zu diesem Zeitpunkt noch nicht feststellen. Des Weiteren konnte in keiner der Proben Azetat, Laktat oder Pyruvat nachgewiesen werden. Die Sulfatkonzentration lag bei allen 224 Ansätzen bei durchschnittlich 15 mM. Die Elemente K, Na, Mg und Ca zeigten in den GMZ- und den B27-Ansätzen jeweils ähnliche Konzentrationen. Die Elemente Al und P konnten nicht nachgewiesen werden. Der Si-Gehalt ist leicht erhöht in H₂-haltigen B27- und GMZ-Ansätzen, welche bei 70 °C inkubieren. Ein signifikanter Unterschied zeigt sich im Eisengehalt: die B27-Ansätze zeigen, unabhängig von den Inkubationsbedingungen, einen sehr niedrigen Eisengehalt im Überstand (etwa 0,2 µM). GMZ-Ansätze, welche mit GGG40 Plättchen versehen worden sind, zeigen dagegen einen erhöhten Eisengehalt von etwa 30 µM bei 70 °C verglichen zu 10 µM bei 30 °C. GMZ-Ansätze, welchen nur H₂ zugesetzt wurde und keine GGG40 Plättchen, zeigten keine erhöhte Eisenkonzentration im Überstand. Die An- bzw. Abwesenheit von GGG40 Plättchen und Wasserstoff sowie die Temperatur haben möglicherweise einen Einfluss auf den Eisengehalt in Lösung in den entsprechenden GMZ-001 Ansätzen, welcher sich in den entsprechenden B27-Ansätzen nicht zeigt bzw. nicht so deutlich ausgeprägt erscheint.

Bedingt durch Umbauarbeiten in unseren Laboren und durch die SARS-CoV-2 Pandemie sind die Labore von Mitte November bis einschließlich Dezember nur eingeschränkt nutzbar. Hierdurch kommt es zu Verzögerungen für die zweite Probenahme der Ansätze, welche daher für den dritten Berichtszeitraum eingeplant wird.

4. Geplante Weiterarbeiten

Im dritten Berichtszeitraum des UMB-II Projektes sollen die Mikrokosmen weiter beprobt werden. Die zweite Probenahme könnte bereits Aufschluss geben, über mögliche Veränderungen in der mikrobiellen Diversität und deren Einfluss auf die Entwicklung geochemischer Parameter und die Korrosion der Gusseisen-Plättchen.

Des Weiteren soll die mikrobielle Diversität der beiden Ausgangs-Bentonite und der t₀-Mikrokosmen bestimmt werden. Für die nähere Bestimmung der Gusseisen-Korrosion werden die jeweiligen Proben durch SEM-EDX analysiert. Innerhalb des kommenden UMB-II Workshops im März 2021 soll mit den Kooperationspartnern abgestimmt werden, welche weiteren Analysen mit den inkubierten Metallplättchen und Bentoniten möglich und notwendig sind.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Vorträge:

Matschiavelli, N.: Progress report des Verbundprojektes UMB-II, 2nd workshop UMB-II (online), 06.10.2021

Matschiavelli, N.: Deutschlands Ausstieg aus der Atomkraft – Was passiert mit dem Müll und welche Rolle spielen Mikroorganismen? Eingeladener Vortrag zum Tag der Wissenschaften am Beruflichen Schulzentrum für Gastgewerbe in Dresden, 23.11.2021

Matschiavelli, N.: Analyzing the microbial influence on corrosion at the bentonite-canister interface in a repository of high-level radioactive waste, interne Abteilungsbesprechung (online), 03.12.2021

Zuwendungsempfänger: Universität Greifswald, Domstr. 11, 17489 Greifswald		Förderkennzeichen: 02 E 11870C
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt C		
Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte, Feld: 2.3		
Laufzeit des Vorhabens: 01.01.2021 bis 31.12.2023	Berichtszeitraum: 01.07.2021 bis 31.12.2021	
Gesamtkosten des Vorhabens: 244.830,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Warr	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Die Arbeitsschwerpunkte (AP3) der Universität Greifswald sind die Veränderungen der Smektitzusammensetzung sowohl in natürlichen als auch in synthetisch gemischten Bentonitproben. Die Reaktionsmechanismen der Smektitänderungen werden in mineralogischen und geochemischen Vergleichsstudien untersucht. Zusätzlich wird der Einfluss verschiedener akzessorischer Mineralien (AP1, AP3), bei der CO₂-Freisetzung (AP2), pH Änderung und zum Redoxzustand (AP2) bestimmt. Änderungen der Smektitzusammensetzung werden auch in Bezug auf mikrobielle Aktivität (AP4) sowie der Korrosion des Fe-Metallkanisters (AP5) untersucht.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Purification and analysis of bulk pure smectite samples and other minerals
- AP2: Mixing and characterization of synthetic bentonite samples for batch reactor experiments at the GRS, UG and BGR
- AP3: Monitoring and mineralogical/geochemical analyses of experiments (XRD, XRF, CEC etc.)
- AP4: More detailed analysis of batch experiments and data analyses
- AP5: Electron microscopy Investigation of experimental products
- AP6: Data analysis and comparison of synthetic bentonites with natural mixtures
- AP7: Evaluation (mechanisms)
- AP8: Reports

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Nach Abschluss des ersten Arbeitspakets (AP-Nr. 3.1: Monate 1-3) im September 2021 machen wir derzeit Fortschritte mit dem zweiten Arbeitspaket (AP-Nr. 3.2: Monat 3-12). Dieses AP besteht aus der Analytik der ersten Reihe von Chargenreaktionen in dem Nabertherm-Rotationsofen, die synthetische Mischungen (mit und ohne organische Säuren) enthalten. Die synthetischen Mischungen wurden sorgfältig aus rein mineralischen Komponenten hergestellt. Neben dem „reinen“ Smektit wurden die Begleitminerale, Pyrit, Calcit und Gips, von Hand gemahlen und nach Größe getrennt, um eine 4 bis 100 µm Fraktion. Die Korngrößentrennung wurde durch Schwerkraftabscheidung in Ethanol gemacht, um Mineralauflösung und Oxidation zu vermeiden. Die Reinheits- und Partikelgrößenverteilungen wurden durch XRD, SEM-EDX und TEM bestimmt. Die synthetischen Mischungen wurden dann unter Verwendung eines Planeten-

Zentrifugalmischers (Thinky-Mischer ARE-250) homogenisiert. Die Reaktionszeit von 4 Wochen bei 180 ° C wurde Anfang Januar abgeschlossen und die Lösungen und Mineralinhaltsstoffe der Experimente werden derzeit für XRD-, FT-IR-, DTA/TG- und CEC-Analysen vorbereitet. Die filtrierten (kolloidfreien) Lösungen werden auch für chemische Analysen durch MS-AES vorbereitet. Die ersten Ergebnisse werden im Februar vorliegen. Unterstützende kristallchemische Untersuchungen der Materialien durch Elektronenmikroskopie (SEM, TEM) sind geplant.

Aufgrund des um drei Monate verzögerten Projektstarts und der zusätzlichen Laboreinschränkungen durch die Pandemie können wir das zweite Arbeitspaket erst etwa im August 2022 abschließen. Dies beinhaltet die Durchführung und Untersuchung einer zweiten Reihe von Batch-Experimenten als eine Ergänzung der ersten Reihe. Aufgrund ähnlicher Verzögerungen bei der GRS haben die Experimente des dritten Arbeitspakets (AP-Nr. 3.3: Monat 13-24) noch nicht begonnen. Daher rechnen wir mit einer gewissen Verzögerung des Projekts, welche sich derzeit auf ca. 6 Monate beläuft.

4. Geplante Weiterarbeiten

Wir werden mit der Analytik der Reaktionsprodukte der ersten Batch Reaktor Versuche fortfahren und weitere Versuchsreihen von synthetischen Bentonitmischungen mit und ohne organischen Säuren fortführen. Wir planen auch, einige ausgewählte Proben aus den Mikrokosmos-Experimenten des HZDR (AP4) zu untersuchen, die jetzt für 6 Monate inkubiert wurden. Wir werden auch mikroskopisch (TEM, FIB-SEM) einige Proben von den Bentonit-Metall-Kontaktflächen verwandter HZDR-Experimente untersuchen.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Podlech, C.; Matschiavelli, N.; Grathoff, G.H., Warr, L.N. (2021): Bentonite alteration in batch reactor experiments with and without organic supplements: Implications for the disposal of radioactive Waste. *Minerals*, 11(9), 932; <https://doi.org/10.3390/min11090932> (Special volume: Clay Mineral Transformations after Bentonite/Clayrocks and Heater/Water Interactions from Lab and Large-Scale Tests)

Manzel, G.H., Podlech, C. Grathoff, G., Kaufhold, S, A., Warr, L.N. (2021): In situ measurements of the hydration behavior of compacted Milos (SD80) bentonite by wet-cell X-ray diffraction in an Opalinus clay pore water and a diluted cap rock brine *Minerals*, 11(10), 1082; <https://doi.org/10.3390/min11101082> (Special volume: Clay Mineral Transformations after Bentonite/Clayrocks and Heater/Water Interactions from Lab and Large-Scale Tests)

Sudheer Kumar, R., C. Podlelech, Grathoff, G., Warr, L.N., Svensson, D. (2021): Thermally induced bentonite alteration in the SKB ABM5 hot bentonite experiment, *Minerals*, 11(9), 1017; <https://doi.org/10.3390/min11091017> (Special volume: Clay Mineral Transformations after Bentonite/Clayrocks and Heater/Water Interactions from Lab and Large-Scale Tests)

Zuwendungsempfänger: Technische Universität München, Arcisstr. 21, 80333 München		Förderkennzeichen: 02 E 11870D
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt D		
Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte, Feld: 2.3		
Laufzeit des Vorhabens: 01.01.2021 bis 31.12.2023	Berichtszeitraum: 01.07.2021 bis 31.12.2021	
Gesamtkosten des Vorhabens: 302.335,00 EUR	Projektleiter: Dr. Krüger	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

- Quantenmechanische Modellierung von Fe(II)-Substitutionen in Smektiten
- Abschätzung des Redoxpotentials von Eisensubstitutionen in Smektiten

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Das Untersuchungsprogramm umfasst folgende Arbeitspakete (AP):

- Methoden und Modelle
- Fe(II) in Smektiten
- Fe(II) in und an Smektitoberflächen
- Zwischenschichtionen in Smektiten
- Eisenkorrosionsphasen

Die zentralen Themen des Projektes sind die rechnerische Modellierung von Fe(II)-Substitutionen in Smektiten (AP2) in Abhängigkeit von Struktur, Ladung und anderer Substitutionen sowie die Abschätzung entsprechender Redoxpotentiale für Fe(II)/Fe(III). Weiterhin werden Fe(II)-Substitutionen in Oberflächen von Smektiten sowie die Sorption von Fe(II) an Oberflächen untersucht (AP3), um Fe(II) in Smektiten umfassend zu charakterisieren. Daneben ist vorgesehen, Solvatation und Koordination von Zwischenschichtionen, die geladene Substitutionen wie Fe(II) kompensieren, zu untersuchen. Mit der Berechnung relativer Energien von Eisenkorrosionsphasen werden Arbeiten der Projektpartner unterstützt.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1: Modelle und Methoden; AP2 Fe(II) in Smektiten

Der Vergleich von Modellierungen von Fe(II)-Substitutionen an äquivalenten Gitterplätzen (AP1) am Beispiel von Pyrophyllit ergab eine Reproduzierbarkeit von relativen Energien besser als 1 kJ/mol. Inzwischen weitgehend abgeschlossene Versuchsrechnungen mit verschiedenen Gittern im reziproken Raum (AP1) zeigen, dass hinreichend genaue relative Energien mit einem Gitterpunkt effizient zu erhalten sind, während absolute Energien mehrere Punkte benötigen. Dies betrifft die Gitterrichtungen a und b, während eine Gittererweiterung in c-Richtung nur geringe Effekte zeigt und damit eingespart werden kann.

Die Ergebnisse der in diesem Projekt abgerundeten Machbarkeitsstudie zu oktaedrischen Fe(II)-Substitutionen in Smektiten (AP2) anhand einfacher transvakanter Mineralmodelle mit vorgegebener Anordnung von Zwischenschichtionen wurden verwendet, um Effekte auf das Fe(II)/Fe(III)-Redoxpotential qualitativ abzuschätzen. Demnach tragen Gitter- und Platzvariationen wenig, benachbarte Fe(III)-Substitutionen etwa -100 mV, tetraedrische Al-Substitutionen etwa -250 mV und geladene Fe(II)- oder Mg(II)-Substitutionen um die -600 mV bei. Diese Abschätzungen dienen als orientierende Arbeitshypothese und sind im Projekt weiter zu verifizieren und besser zu quantifizieren.

Modellierungen zu oktaedrischen Fe(II)-Substitutionen in Smektiten wurden für cis-vakanten Pyrophyllit als Modell eines schwach substituierten Smektits fortgesetzt und auf cisvakanten Montmorillonit ausgedehnt (AP2). Dabei werden Fe(II)-Substitutionen durch ein Na⁺-Zwischenschichtion ohne Solvation kompensiert. Im Gegensatz zu den Vorstudien wird dabei die Anordnung der Na⁺-Ionen optimiert. Alle möglichen Anordnungen von zwei Fe(II)-Substitutionen in einer 2×1×1-Einheitszelle des Pyrophyllits wurden untersucht. Bisherige Ergebnisse zeigen, dass zwei Fe(II)-Substitutionen auf benachbarten Plätzen um etwa 40 kJ/mol und auf übernächsten Plätzen um etwa 20-25 kJ/mol ungünstiger sind als bei weiterem Abstand. Für Montmorillonit wurden auch alle Anordnungen einer Fe(II)- und einer Mg(II)-Substitution optimiert. Für benachbarte Substitutionen wurden um etwa 55 kJ/mol und für übernächste Gitterplätze um etwa 20 kJ/mol höhere Energien erhalten als für größere Abstände. Diese Werte variieren um 3-10 kJ/mol je nach Art der Verbrückung (O oder OH) zwischen den geladenen Substitutionen. Da die Variation der Anordnung der Zwischenschichtionen teils merkliche Energieunterschiede für äquivalente Anordnungen der Fe(II)-Substitutionen ergibt, sind hier weitere Arbeiten notwendig. Geometriebetrachtungen zeigen, dass aufgrund von Gitterspannungen Fe(II)-O-Abstände zu benachbarten Fe(II)- oder Mg(II)-Substitutionen in Pyrophyllit und Montmorillonit im Mittel um 3-6 pm kürzer sind als zu Al-Nachbarn. Gitterkonstanten nehmen beim Einbau von Fe(II) sehr ähnlich zu wie für Mg(II), interessanterweise auch für eine zweite Fe(II)-Substitution. Am ausgeprägtesten sind sie für c mit etwa +1.5 % für die erste und +1 % für die zweite geladene Substitution im Vergleich zu Pyrophyllit. Als nächster Schritt ist die Anpassung analoger Smektitmodelle mit Fe(III)-Substitutionen geplant, um Fe(II)/Fe(III)-Redoxpotentiale bestimmen zu können.

Versuchsrechnungen mit solvatisierten Na-Zwischenschichtionen für Pyrophyllit mit einer Fe(II)-Substitution zeigen Energieunterschiede von bis zu 40 kJ/mol, je nach Anordnung der Wasserliganden. Dies zeigt, dass die Modelle mit Zwischenschichtsolvation entweder auf eine repräsentative Wasseranordnung oder eine Mittelung derartiger Anordnungen zurückgreifen müssen, um Energieunterschiede für verschiedene Anordnungen von Fe-Substitutionen und daraus Redoxpotentiale zu bestimmen.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP1: Modelle und Methoden; AP2: Fe(II) in Smektiten

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Leibniz Universität Hannover, Welfengarten 1, 30167 Hannover		Förderkennzeichen: 02 E 11870E
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt E		
Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte, Feld: 2.3		
Laufzeit des Vorhabens: 01.01.2021 bis 31.12.2023	Berichtszeitraum: 01.07.2021 bis 31.12.2021	
Gesamtkosten des Vorhabens: 228.860,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Renz	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Bentonit-basierte Nahfeldbarrieren können in einem Endlager für hoch-radioaktive Abfälle aufgrund erhöhter Temperaturen und einer Wechselwirkung mit wässrigen Lösungen aus dem umliegenden Wirtsgestein eine für die Langzeitsicherheit des Endlagers relevante Umwandlung erfahren. Im Projekt UMB wurde festgestellt, dass bei 25, 90 und 120 °C eine erhebliche pH-Absenkung sowie eine CO₂- Gasbildung durch eine teilweise bis vollständige Zersetzung der in Bentoniten vorhandenen Karbonate ablaufen kann. Im Projekt UMB-II sollen die beteiligten Reaktionsmechanismen aufgeklärt werden. Weitere Arbeitsschwerpunkte sind (i) die Abhängigkeit der Lösungsrate der Smektite vom Bentonit-Typ, (ii) der Einfluss der Fe(II)/Fe(III)-Redoxreaktion (experimenteller und quantenchemischer Ansatz), (iii) die Unterschiede in Korrosionsraten und –produkten an einer Eisen-Bentonit-Grenzfläche (mit Einsatz einer zu optimierenden Mößbauerspektroskopie) und (iv) der Einfluss der Bentonit-eigenen mikrobiellen Population.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Mößbauerspektroskopische Messungen und Auswertungen von Bentonitmaterialien zur Aufklärung des Fe(II)/Fe(III) Verhältnisses aus den Versuchen der anderen Projektteilnehmer (Speziation)
- AP2: Analytischer Beitrag zur Korrosionsratenbestimmung an der Eisen-Bentonit-Grenzfläche
- AP3: Optimierung der Methoden in der Mößbauerspektroskopie zur Verbesserung der Messergebnisse

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP1 & 2: Es wurden weitere Mößbauermessungen für die BGR, das HZDR sowie die Universität Greifwald angefertigt und ausgewertet. Dabei wurde eine Phasenbestimmung sowie eine quasi-quantitative Analyse der Fe(II)/Fe(III)-Verhältnisse durchgeführt.
- AP3: Es wurden neue ^{57}Co -Strahler gekauft und verbaut, welche eine höhere Aktivität im Vergleich zu den bisher verwendeten Quellen besitzen und damit eine Reduktion der Messzeit ermöglichen. Zusätzlich wurde ein Siliziumdriftdetektor beschafft, welcher eine deutlich verbesserte Energieauflösung als herkömmliche Silizium-PIN-Detektoren aufweist. Dadurch konnte das Signal-zu-Rausch-Verhältnis erhöht und die Messzeiten verringert werden. Zusätzlich wurde eine neue Auswerteeinheit für das Mößbauerspektrometer angefertigt, welche die gleichzeitige Verwendung von zwei Detektoren erlaubt.

4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1 & 2: Es sollen weitere Mößbauermessungen für alle weiteren Projektteilnehmer vorgenommen werden. Diese beziehen sich vor allem auf die Phasenanalyse sowie der Quantifizierung der Fe(II)/Fe(III)-Verhältnisse.
- AP3: Es sind weitere Optimierungen im Bereich der Detektorelektronik sowie der Auswerteeinheit geplant. Des Weiteren wird die Software der Auswerteeinheit optimiert, um eine schnellere Detektion einzelner Photonenergebnisse zu erlauben und somit höhere Countraten zu ermöglichen. Zusätzlich soll das Konzept der zweidimensionalen Datenaufnahme weiter ausgebaut und auf mehrere Detektoren ausgeweitet werden.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Stephen Klimke, Stephan Kaufhold, Moritz Jahns, Franz Renz: "MÖSSBAUER INVESTIGATION OF CORROSION MECHANISM AT IRON-BENTONITE BARRIERS", ICAME2021, Brasov, Rumania, 5th-10th September 2021

Moritz Jahns, Stephen Klimke, Justus Pawlak, Robert Fatzke, Franz Renz: "TWO DIMENSIONAL MÖSSBAUER AND XRF ANALYSIS", ICAME2021, Brasov, Rumania, 5th-10th September 2021

Zuwendungsempfänger: Leibniz Universität Hannover, Welfengarten 1, 30167 Hannover		Förderkennzeichen: 02 E 11870F
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt F		
Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte, Feld: 2.3		
Laufzeit des Vorhabens: 01.01.2021 bis 31.12.2023	Berichtszeitraum: 01.07.2021 bis 31.12.2021	
Gesamtkosten des Vorhabens: 254.261,00 EUR	Projektleiter: Dr. Dultz	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

In dem Vorhaben soll die Bewertung der Stabilität geotechnischer Bentonitbarrieren verbessert werden. Hierfür werden im Verbund mit weiteren Kooperationspartnern aufeinander abgestimmte experimentelle und analytische Arbeiten durchgeführt um ausgewählte Aspekte der Umwandlung von Bentonit im Kontakt mit Formationswässern der geologischen Barriere unter Endlagersystem-nahen Bedingungen zu untersuchen. Insbesondere wird die Auflösung von Carbonaten und CO₂-Freisetzung, Entstehung von Acidität und Mechanismen der Protonenpufferung, Metallkorrosion in Kontakt mit Bentoniten und die Bedeutung der Adsorption von Fe an Kantenflächen der Tonminerale für deren Löslichkeit untersucht.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Auflösung von Carbonaten und CO₂-Freisetzung
- AP2: Acidität der Bentonite bei erhöhten Temperaturen
- AP3: Lösungs- und Umwandlungsmechanismus der Smektite in Bentoniten
- AP4: Metallkorrosion in Bentoniten mit/ohne mikrobiellen Einfluss
- AP5: Fe(II)/Fe(III)-Redoxreaktion auf atomarem Niveau

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP1: Für die in 2022 vorgesehene tomographische Untersuchung von Umwandlungsreaktionen in Bentoniten durch Carbonate sowie Fe(II) und S enthaltende Minerale wurden Proben für die *ex situ* Untersuchung präpariert und bei der GRS in einer Zeitreihe 1, 10, 100, 1000 und 10000 h 120 °C und 2 bar ausgesetzt. Um die Umsätze dieser Mineralreaktionen über verschiedene Parameter der Lösungs- bzw. Festphase (pH, EC, wasserlösliche Kationen und Anionen, Fe(II)/Fe_{gesamt}-Gehalt) zu quantifizieren, wurden Vorversuche mit drei Bentonitproben, verschiedenen Reinmineralen und unter Zusatz verschiedener Lösungen/eines Oxidationsmittels durchgeführt. Bei einem recht weiten fest/flüssig-Verhältnis von 1:10 ist im Versuchszeitraum von 50 Tagen ausreichend Probematerial für die vorgesehenen Analysen zu gewinnen um reaktionsbedingte Veränderungen feinkalig zu erfassen. Mit der regulären Messreihe kann damit Anfang 2022 begonnen werden.
- AP2: Zur Beschreibung der Entstehung von Azidität in Bentoniten wurde in Kooperation mit dem Institut für Mineralogie der LUH die Bestimmung von Fe(II)/Fe_{gesamt} für kleine

Probemengen (5-25 mg) im HF-Aufschluss unter Zusatz von Ammoniumvanadat und Anfärbung mit Bipyridil durchgeführt. Deutlich voneinander abweichende Fe(II)/Fe_{gesamt}-Verhältnisse in den Bentoniten wurden festgestellt. Für einen Bentonit wurde ein in HF unlöslicher Rückstand erhalten, der noch stofflich gekennzeichnet werden muss um in diesem mögliche Fe(II)-Gehalte auszuschließen. In Experimenten in AP1 erhaltene überstehende Lösungen wurden einbezogen. Die Modellversuche ergaben, dass sich die Versauerungsreaktivität durch Zusatz eines Oxidationsmittels erheblich erhöht und eine umfänglichere Betrachtung der Umsetzungen erlaubt. Nach 20 Tagen Reaktionszeit erfolgt keine weitere pH-Absenkung und nach 50 Tagen ist der Umsatz minimal. Es wurden Hinweise auf umfängliche interne Protonenpufferung durch Protolyse von Silicaten unter Freisetzung der Neutralkationen Na, K, Mg und Ca erfolgt.

AP3: Keine Arbeiten im Berichtszeitraum.

AP4: Ein Verfahren zur Kennzeichnung der Benetzungseigenschaften über die Ausbildung des Kontaktwinkels an der 3-Phasen-Grenze fest/flüssig/gasförmig wurde getestet um mögliche hydrophobe Eigenschaften durch mikrobiellen Besiedelung (HZDR Arbeiten) zu untersuchen.

AP5: Um die mögliche Zunahme der chemischen Stabilität von Smektit durch Adsorption von Fe-Ionen an die Kantenflächen in Laborversuchen über die Si-Freisetzung zu analysieren, wurde zunächst der Gehalt an amorpher Kieselsäure in den Bentoniten (als weitere Quelle für Si zusätzlich zur Kantenauflösung) und die DCB-löslichen Fe-, Al- und Mn-Mengen (als mögliche Senke für an Kanten freigesetztes Si) quantifiziert. Da diese Pools recht groß sind, kann der Parameter 'Si-Freisetzung' nicht einfach zur Kennzeichnung der Stabilität von Smektit genutzt werden. Zur Untersuchung der Veränderung der Si-Freisetzung nach Anlagerung von Fe³⁺ wurde auch Al³⁺ aufgenommen und jeweils 2 Bentonite aufbereitet: (i) original, (ii) DCB-Extraktion und (iii) DCB- + NaOH-Extraktion. Die Proben wurden mit FeCl₃ bzw. AlCl₃ Lösungen in jeweils 5 Konzentrationen versetzt, gewaschen und sind damit für Untersuchung der Si-Freisetzung in Zeitreihen bereit.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP1: Vorversuche zur Bestimmung der in situ CO₂-Freisetzung aus Bentoniten in einer an einem FTIR-Spektrometer befestigten p/T Zelle bei verschiedenen Randbedingungen werden begonnen und mit GRS abgestimmt. Beginn tomographischer Untersuchungen.

AP2: Die Protonenpufferreaktivität soll an den Bentonitproben und den aus diesen separierten Korngrößenfraktionen mittels einer Säureextraktion und Quantifizierung der freigesetzten Neutralkationen bestimmt werden. Schwerminerale sollen abgetrennt und auf ihre mineralogische Zusammensetzung untersucht werden.

AP4: Von den Untersuchungen zur Metallkorrosion in Bentoniten mit/ohne mikrobiellen Einfluss am HZDR werden aus der ersten Versuchsreihe die Prüfkörper erhalten und beginnend im Februar 2022 mit Konfokaler Laser Scanning Mikroskopie (CLSM) hinsichtlich der Veränderung der Oberflächenrauigkeit und der Volumenveränderung gekennzeichnet. Die Veränderung der Benetzbarkeit (Hydrophobie) durch die Besiedelung mit Mikroorganismen soll in Kontaktwinkelmessungen geprüft werden.

AP5: Auswertung des in 2021 begonnen Vorversuchs zur Erhöhung der chemischen Stabilität von Smektit durch Adsorption von Fe-Ionen an die Kantenflächen.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln	Förderkennzeichen: 02 E 11880
Vorhabensbezeichnung: Sicherheitsrelevante Untersuchungen zur Bentonitaufsättigung (SIRUB)	
Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte, Feld: 2.3	
Laufzeit des Vorhabens: 01.04.2021 bis 31.12.2023	Berichtszeitraum: 01.04.2021 bis 30.06.2021
Gesamtkosten des Vorhabens: 1.248.124,00 EUR	Projektleiter: Dr. Kröhn

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Im Zusammenhang mit der Wasseraufnahme von Bentonit/-barrieren ist immer noch eine Reihe von Fragen offen. Den folgenden Fragen soll im Projekt SIRUB nachgegangen werden:

- Wie entwickelt sich die schmale, vollaufgesättigte Zone am Bentonit-Wasser-Kontakt?
Motiviert durch Beobachtungen im Projekt EBS (FKZ 02E9430 (BMW A), GRS-199)
- Wie quillt Bentonit in einen begrenzt freien Raum?
Motiviert durch Mitarbeit in der Task Force EBS, Projekt WiGru-9 (FKZ 02E11941 (BMW i), laufend) und einen Demonstrationsversuch mit Pellets im EU-Projekt BEACON
- Können Einheitsisothermen aus Montmorillonitgehalt und Kationentyp abgeleitet werden?
Motiviert durch beobachtete Unterschiede in Na- und Ca-Bentonit, Projekt BIGBEN (FKZ 02E11284 (BMW i), GRS-615)
- Welche Endporositäten werden nach voller Aufsättigung mit Wasserdampf erreicht?
Motiviert durch neuerliche Auswertung der Versuche im Projekt EBS (s. o.) im Projekt WiGru-7 (FKZ 02E11102 (BMW i), GRS-503)
- Mit welcher Dynamik wird Wasser aus Klüften im Kristallin in den Buffer eingetragen?
Ergänzung der Task 8 „Buffer-Rock Interaction“ der Task Forces EBS und GWFTS mit Blick auf die Fließvorgänge in einer Kluft, BMW i-Projekte E-DuR, WiGru-6, A-DuR, WiGru-7, QUADER (FKZ 02E10336, 02E10548, 02E10558, 02E11102 und 02E11213, GRS-430)

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Bei der Durchführung des Vorhabens werden folgende Arbeitspakete bearbeitet:

- AP1: Vorbereitende Arbeiten
- AP2: Aufsättigung am Bentonit-Wasser-Kontakt
- AP3: Begrenzt freie Quellung
- AP4: Einheitsisothermen
- AP5: Endporosität nach der Aufsättigung über Dampf
- AP6: Interaktion von Grundwasser und Bentonit im Kristallin
- AP7: Erstellung des Abschlussberichts

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Die vorbereitenden Arbeiten in AP1 wurden fortgesetzt. Für die geplanten optischen Messungen wurde ein spezieller Messraum eingerichtet und ein Messtisch für Kameraanwendungen beschafft. Der Kauf der Infrarotkamera kam aus zwei Gründen bislang nicht zustande. Ein Personalwechsel in der Zeit zwischen den Vorgesprächen und der Projektbewilligung hat den bisher favorisierten Anbieter unattraktiv gemacht. Pandemie bedingte Kontaktbeschränkungen haben Kameratests erheblich verzögert, so dass noch keine Entscheidung über eine Alternativkamera getroffen werden konnte. Der 3D-Drucker wurde in einen einsatzbereiten Zustand versetzt. Als Einstieg in eine automatisierte Bildverarbeitung wurde eine MATLAB-gesteuerte Bildaufzeichnung mit Hilfe einer Webcam realisiert.

Für AP4 wurden 15 Proben unterschiedlicher Bentonite beschafft. Parallel dazu durchlief das für die Bestimmung der Isothermen benötigte Feuchtemessgerät VSA eine umfangreiche Wartung. Nach Überprüfung der Funktionstüchtigkeit wurde eine erste vollständige Hysteresekurve gemessen.

Eine für AP5 erforderliche Zelle wurde aus Teilen bereits bestehender Zellen sowie speziell gedruckter Zellenkomponenten konzipiert und nach Bereitstellung des 3D-Druckers erstellt. Ein Vorversuch zeigte jedoch eine unerwartet hohe Sensitivität der gedruckten Bauteile gegen Wasseraufnahme und Druckrichtung. Korrekturen in der Zellenkonstruktion waren daher erforderlich. Neue Bauteile werden aktuell hergestellt.

In AP6 soll der beschaffte 3D-Scanner unter anderem für die Überprüfung der Druckgenauigkeit gedruckter Kluftoberflächen eingesetzt werden. Erste Tests wurden durchgeführt, deuteten jedoch entgegen den Erwartungen an das Gerät darauf hin, dass die Genauigkeit des Scanners für diese spezielle Aufgabe nicht ausreicht. Aus diesem Grund wurde nach technischen Lösungen für das Problem und nach Alternativen gesucht.

Die Durchführung von Versuchen nach AP2, AP3 und AP6 war noch nicht möglich.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Abschluss von Vorbereitung und Aufbau der Messplätze (AP1)
- Fortsetzung der notwendigen Beschaffungen, insbesondere der Infrarotkamera (AP1)
- Anfertigung von Messzellen (AP1)
- Anfertigung spezieller Proben zur Eichung einer Korrelation zwischen dem Wassergehalt im Bentonit und den optischen Aufnahmen
- Beginn der Aufsättigungsversuche (AP2 und AP3)
- Fortsetzung der Isothermenmessungen (AP4)
- Verbesserung der Messzelle und Beginn der Aufsättigungsversuche (AP5)
- Lösung des Problems mit dem 3D-Scanner (AP6)
- Gestaltung des Versuchsaufbaus für den Kontakt einer künstlichen Kluft mit kompaktiertem Bentonit (AP6)

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Auftragnehmer: BGE Technology GmbH, Eschenstr. 55, 31224 Peine		Förderkennzeichen: 02 E 11890A	
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Entwicklung und Test eines erweiterten Hoek-Brown Stoffmodells zur Berücksichtigung anisotropen Festigkeitsverhaltens bei der Anwendung der Integritätskriterien für kristalline Wirtsgesteine (BARIK), Teilprojekt A			
Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit Bereich C3: Sicherheitsnachweis, Feld: 3.1			
Laufzeit des Vorhabens: 01.03.2021 bis 31.10.2023		Berichtszeitraum: 01.07.2021 bis 31.12.2021	
Gesamtkosten des Vorhabens: 393.063,82 EUR		Projektleiter: Jobmann	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das wesentliche Ziel dieses Vorhabens ist die Entwicklung und der Test eines erweiterten dreidimensionalen Hoek-Brown Stoffmodells, das in der Lage ist, anisotropes Festigkeitsverhalten sowohl innerhalb der intakten kristallinen Gesteinsmatrix als auch in einem mit mehreren Klüften in verschiedener Lage durchzogenen Gebirgskörper zu berücksichtigen. Es geht darum, die Grenzbedingung so zu formulieren, dass die festigkeitsreduzierenden Eigenschaften des jeweiligen Kluftsystems adäquat im Zuge des Integritätsnachweises berücksichtigt werden können.

Das neue Stoffmodell soll in zwei unterschiedliche Computercodes implementiert und getestet werden. Mit der Verwendung zweier Computercodes wird der Notwendigkeit Rechnung getragen, das Ungenauigkeiten, die sich aus der Verwendung unterschiedlicher Codes ergeben, abgebildet und im Hinblick auf anstehende Sicherheitsuntersuchungen bewertet werden können. Anhand der Ergebnisse, die mit dem neuen Stoffmodell erzielt werden, soll geprüft werden, ob die aktuelle Formulierung und Quantifizierung des Dilatanz-Kriteriums im Falle kristalliner Wirtsgesteine ausreichend ist, oder ob Änderungen bzw. Konkretisierungen mit Blick auf die Berücksichtigung anisotropen Festigkeitsverhaltens notwendig sind. Zur rechnerischen Abbildung des korrekten effektiven Spannungszustandes wird auch eine Berücksichtigung des Biot-Koeffizienten als hydromechanischer Kopplungsparameter im geklüfteten Gestein erfolgen.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Gemäß den genannten Zielen, sind die Arbeiten in diesem Vorhaben in folgende Arbeitspakete aufgeteilt:

- AP1: Entwicklung des anisotropen Stoffmodells
- AP2: Laborversuche zur Eigenschaftsbestimmung
- AP3: Implementierung und Test
- AP4: Anwendung und Bewertung
- AP5: Dokumentation

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im Rahmen des Arbeitspaketes 1 wird ein Stoffmodell für kristalline Gesteine entwickelt, das in der Lage ist, das anisotrope Festigkeitsverhalten von geklüfteten kristallinen Gestein mathematisch zu beschreiben. Dieses Stoffmodell basiert auf dem Modell von Hoek und Brown, die in den letzten ca. 15 Jahren ihr Modell, primär aus praktischen Erfahrungen, entwickelt haben, welches den Grad der Klüftigkeit in die Berechnungen zum Festigkeitsverhalten eines Hartgesteins einbezieht. Ein Nachteil des Hoek-Brown Ansatzes ist, dass es sich um ein isotropes Stoffmodell handelt. Dieser Nachteil soll durch das zu entwickelnde Stoffmodell insoweit überwunden werden, dass man, in Ergänzung zu dem bisherigen Ansatz, in die Lage versetzt wird, den Einfluss von Lage und der Orientierung von Klüften auf das Festigkeitsverhalten eines kristallinen Gesteins bestimmen zu können.

Zu diesem Zweck wurde im Berichtszeitraum eine detaillierte Literaturrecherche unter Sichtung einer Vielzahl relevanter Veröffentlichungen durchgeführt. Ziel war es, herauszufinden, welche Ansätze für eine Modifizierung des Hook-Brown Stoffmodells in der Literatur bisher verwendet bzw. entwickelt wurden. Mit Blick auf ein geklüftetes Gestein sind solche Ansätze von besonderem Interesse, die eine Berücksichtigung von ein oder mehreren Schwächeflächensystemen im Stoffmodell enthalten.

Im Rahmen mehrerer Treffen mit dem Verbundpartner Technische Universität Bergakademie Freiberg (online) wurden die Ergebnisse der Literaturrecherche diskutiert. Im Ergebnis der Diskussionen wurde ein Konzept für erfolgshöflich empfunden, dass in mehrere Teile untergliedert ist, die sich in Summe als eine Art Baukastenprinzip zu einer Einheit zusammenfügen lassen. Dabei sind im mechanischen Teil eigenständige Konzepte für die drei Kernthemen: „Anisotropes elastisches Verhalten“, „Anisotropes Versagensverhalten“ und „Entfestigung während der Plastifizierung“ erörtert worden. Die Hydraulik folgt als eigenständiger Baustein.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Finalisierung eines Ansatzes für ein erweitertes Stoffmodell zur weiteren Bearbeitung
- Implementierung des Ansatzes in das Computer-Programm FLAC-3D und Durchführung von Tests zur Bewertung der korrekten Funktion

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Technische Universität Bergakademie Freiberg, Akademiestr. 6, 09599 Freiberg		Förderkennzeichen: 02 E 11890B
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Entwicklung und Test eines erweiterten Hoek-Brown Stoffmodells zur Berücksichtigung anisotropen Festigkeitsverhaltens bei der Anwendung der Integritätskriterien für kristalline Wirtsgesteine (BARIK), Teilprojekt B		
Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit Bereich C3: Sicherheitsnachweis, Feld: 3.1		
Laufzeit des Vorhabens: 01.03.2021 bis 31.10.2023	Berichtszeitraum: 01.07.2021 bis 31.12.2021	
Gesamtkosten des Vorhabens: 294.776,55 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Konietzky	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Projekt beinhaltet die Entwicklung eines nichtlinearen elasto-plastischen Stoffgesetzes für die kristalline Matrix mit zuzüglich bis zu drei Schwächeflächen. Berücksichtigt werden weiterhin Erweichungsfunktionen für den Nachbruchbereich sowie eine hydraulische Kopplung in Form einer anisotropen Permeabilitätsentwicklung als Funktion der Schädigung inkl. einer Aktualisierung des Biot-Koeffizienten. Die Validierung des Stoffgesetzes erfolgt an diversen Laborversuchen. Die Anwendung konzentriert sich auf die Nutzung als Dilatanzkriterium für Sicherheitsuntersuchungen im Endlagerbereich.

Das Projekt wird in Kooperation mit der BGE TECHNOLOGY GmbH durchgeführt.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Das Projekt BARIK gliedert sich in 5 Arbeitspakete (AP).

AP1: Entwicklung Stoffmodell:

Entwicklung eines nichtlinearen elasto-plastischen Stoffgesetzes auf Basis der Hoek-Brown-Kriteriums unter Berücksichtigung von bis zu drei Schwächeflächen zuzüglich Gesteinsmatrix und strain-softening-Funktionen sowie die Kopplung des mechanischen Stoffgesetzes mit einem hydraulischen in Form anisotroper Permeabilitätsentwicklung auf Basis der mechanischen Schädigungsentwicklung.

AP2: Laborversuche:

Durchführung von rein mechanischen und HM-gekoppelten Laborversuchen zur Validierung des Stoffgesetzes (Matrix-Versuche, Kluft-Versuche, gekoppelte Versuche).

AP3: Implementierung und Test:

Umsetzung und Implementierung des entwickelten Stoffgesetzes in die zwei numerischen Computercodes FLAC3D von ITASCA und OpenGeoSys.

AP4: Evaluierung:

Evaluierung des Stoffgesetzes beim Einsatz als Dilatanzkriterium.

AP5: Dokumentation:

Zwischenzeitliche und abschließende Dokumentation aller Entwicklungen und Arbeiten sowie Datensicherung.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Erweiterte und begleitende Literaturrecherche und -aufbereitung zum Themenkomplex Entwicklung eines Hoek-Brown basierten anisotropen Stoffmodells hinsichtlich des mechanischen als auch hydraulischen Ansatzes. Darauf aufbauend Anstellen von Überlegungen zur Umsetzung des Ansatzes des veränderlichen Biot-Koeffizienten in Abhängigkeit des Schädigungszustandes (AP1).

Weitere Absprachen und Konkretisierung des Umfanges der laborativen Arbeiten sowie Beginn der Durchführung des festgelegten Versuchprogrammes (AP2).

Einarbeitung in die Grundlagen der programmtechnischen Implementierung von UDM (User Defined Models) in die Software FLAC3D via DLL.

4. Geplante Weiterarbeiten

Erarbeitung eines Planes der Umsetzung des Stoffgesetzkonzeptes in die Computerprogramme. Im Fortlaufen des Projektes wird das Konzept des Stoffgesetzes stufenweise als UDM für FLAC3D umgesetzt (erst mechanisch, später hydromechanisch gekoppelt) (AP3).

Parallel werden weiter die geplanten Laborversuche zur Materialcharakterisierung durchgeführt (AP2).

Ggf. werden im Rahmen der oben genannten Arbeiten kleinere Anpassungen im Stoffmodellkonzept notwendig.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Auftragnehmer: BGE Technology GmbH, Eschenstr. 55, 31224 Peine		Förderkennzeichen: 02 E 11900
Vorhabensbezeichnung: Langzeitsicherheit von Verschlussystemen in Schächten und Rampen im Vergleich (LARYSSA)		
Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte, Feld: 2.3		
Laufzeit des Vorhabens: 01.06.2021 bis 31.05.2023	Berichtszeitraum: 01.07.2021 bis 31.12.2021	
Gesamtkosten des Vorhabens: 479.325,30 EUR	Projektleiter: Herold	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Der Zugang zu einem Endlager in einer tiefen geologischen Formation bildet, wie auch im konventionellen Bergbau, ein entscheidendes Nadelöhr für den Betrieb solcher Anlagen. Durch die Tageszugänge werden alle Personal- und Materialströme bewegt, und es findet die Versorgung der untertägigen Anlage mit allen notwendigen Medien statt. Die direkte Verbindung zwischen der Biosphäre und den Grubenhohlräumen stellen einen potentiellen Zu- bzw. Austrittspfad von Fluiden nach Abschluss der Betriebsphase dar. Ihrem Verschluss kommt damit innerhalb des Multibarrierensystems eines Endlagers eine entscheidende Rolle zu. Mit dem dauerhaften Verschluss soll ein Zustand geschaffen werden, der dem natürlichen Isolationspotential der geologischen Barriere bzw. der hangenden Schutzschichten soweit wie möglich entspricht. Trotz dieser großen Bedeutung werden bei der Auswahl und der Gestaltung von Tageszugängen zumeist betriebliche, betriebssicherheitsrelevante und wirtschaftliche Kriterien berücksichtigt. Mit dem Vorhaben sollen die langzeitsicherheitsrelevanten Aspekte beim Verschluss von Tageszugängen untersucht und die beiden Grundkonzepte eines Schachtes oder einer Rampe verglichen werden, um so die für den Nachweis der Langzeitsicherheit relevanten Unterschiede zu identifizieren und zu bewerten. Schachtverschlusskonzepte sind für Endlager in unterschiedlichen Wirtsgesteinen bekannt; wohingegen Verschlussysteme speziell für Rampen zunächst noch entwickelt werden müssen. Die Basis dafür bilden aus FuE-Vorhaben bekannte generische Standortmodelle, an denen bisher Schachtverschlüsse vorgesehen waren. Im Weiteren ist die bautechnische Machbarkeit von Rampenverschlüssen zu bewerten und eine Methode zum Vergleich der Verschlussysteme sowie deren Verschlussvermögen zu entwickeln. Die Methode wird für den Vergleich von Schächten und Rampen innerhalb eines Endlagersystems bzw. Wirtsgesteins angewendet. Die Analyse dient dem Vergleich der Systeme und wird eine zusätzliche Entscheidungsgrundlage für die Wahl der Tageszugänge schaffen.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Verschlusskonzepte
- AP2: Entwicklung einer Methodik zum Vergleich
- AP3: Nachweis des Verschlussvermögens
- AP4: Vergleich und Bewertung
- AP5: Berichtswesen

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP1: Im Vorhaben werden acht unterschiedliche Endlagersysteme berücksichtigt: Salz – steile Lagerung, Salz – flache Lagerung, Ton – mächtig, Ton – geringmächtig, Kristallin – KBS3-Konzept, Kristallin – multipler ewG, Kristallin – Salz als überlagernder ewG, Kristallin – Ton als überlagernder ewG. Für diese acht Endlagersysteme bestehen bereits Schachtverschlusskonzepte. Rampenverschlüsse sind für Kristallin bekannt. Für alle bekannten Verschlusskonzepte wurde eine Zusammenfassung erstellt. Die Zusammenfassung beinhaltet die berücksichtigten (Sicherheits-)Anforderungen sowie die Beschreibung der technischen Planung und alle für die weitere Betrachtung wichtigen Eigenschaften. Ergänzend wurden bisher nicht vorhandene Rampenverschlusskonzepte in Salz und Tongestein erarbeitet. Die Entwürfe berücksichtigen die gleichen geologischen Randbedingungen wie die entsprechenden Schachtverschlüsse. Die vorgesehenen Verschlussmaterialien sind ebenso gleich. Unterschiede bestehen in der Art und Dimensionierung der Verschlusselemente. Beispielsweise wurden innerhalb der Rampen keine bitumenverfüllten Schottersäulen berücksichtigt. Die Einbautechnik solcher Elemente ist für eine Rame nicht geeignet. Gemäß der Endlagersicherheitsanforderungsverordnung (EndlSiAnfV 2020) muss das Sicherheitskonzept eine Darstellung aller vorgesehenen Barrieren des Endlagersystems, insbesondere der „wesentlichen“ Barrieren, ihrer jeweiligen Sicherheitsfunktionen und ihres Zusammenwirkens, enthalten. Die Sicherheitsfunktionen und Leistungsziele der Verschlusselemente in den unterschiedlichen Verschlusskonzepten (Schacht und Rampe) wurden beschrieben. Ergänzend wurde eine Übersicht erarbeitet, in der die regulatorischen Anforderungen an die Verschlussysteme zusammengefasst sind.
- AP2: Für den Vergleich von Schacht und Rampe innerhalb eines Endlagersystems wurden geeignete Bewertungsmaßstäbe identifiziert. Es wird zwischen der Bewertung des Gesamtsystems und den einzelnen Verschlusselementen unterschieden. Für das Gesamtsystem ist das Zusammenwirken der Elemente und damit der Gesamtwiderstand des Verschlusses entscheidend. Ein Vergleich kann über die Bewertung des Gesamt- und der Einzelwiderstände erfolgen. Einzelwiderstände können für die in Reihe geschalteten Verschlusselemente ausgewiesen werden. Der Einzelwiderstand eines Verschlusselementes setzt sich aus den parallel geschalteten Widerständen des Baukörpers, der Kontaktzone und der Auflockerungszone zusammen. Die Widerstände dieser drei Komponenten sind von der Ausführung der Verschlusselemente abhängig und können einzeln bestimmt werden. Diese Einzelwiderstände können wiederum durch Zustandsgrößen bzw. physikalische Eigenschaften beschrieben werden. Im Berichtszeitraum wurde mit der Durchführung von Parameterstudien für das Gesamtsystem begonnen. Für Parameterstudien an einzelnen Verschlusselementen wurde eine einheitliche Vorlage zur Vorbemessung erarbeitet.

4. Geplante Weiterarbeiten

- AP2: Die Parameterstudien zu den verschiedenen Konzepten werden mit dem Ziel der Identifizierung der für die Funktionsfähigkeit der Verschlussysteme wesentlichen Einflussgrößen bzw. sensitiven Parameter weitergeführt. Die Parameterstudien werden mit Hilfe der erarbeiteten Vorlage zur Vorbemessung vorgenommen.
- AP3: Mit Abschluss der Parameterstudien wird die Vorbemessung ausgewählter Verschlusselemente begonnen. Im Fokus steht der Dichtheitsnachweis. Für den Nachweis der Herstellbarkeit werden technischen Analoga und Anwendungsbeispiele recherchiert.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e. V., Bautzner Landstr. 400, 01328 Dresden		Förderkennzeichen: 02 E 11911A
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Vorhersage der heterogenen Radionuklidsorption auf Kluft- und Störungsflächen in granitischen Gesteinen: Parametrisierung und Validierung verbesserter reaktiver Transportmodelle (WTZ-Granit), Teilprojekt A		
Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte, Feld: 2.3		
Laufzeit des Vorhabens: 01.04.2021 bis 31.03.2024	Berichtszeitraum: 01.07.2021 bis 31.12.2021	
Gesamtkosten des Vorhabens: 253.632,00 EUR	Projektleiter: Dr. Fischer	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Übergeordnetes Ziel des Verbundprojektes ist die Erarbeitung einer verallgemeinerungsfähigen Parametrisierung reaktiver Transportmodelle in geklüfteten Kristallingesteinen. Diese Parametrisierung soll es erlauben, den quantitativen Einfluss der Mikrometer- und Submikrometerrauhheit von Kluft- und Störungsflächen in kristallinen Wirtsgesteinen in reaktiven Transportmodellen zu berücksichtigen. Die Anwendung dafür liegt in der verbesserten Vorhersagbarkeit von Radionuklidmigration und -rückhalt in Simulationsrechnungen.

Die Verbesserung der Zusammenarbeit zwischen deutschen und russischen universitären und außeruniversitären Forschungsinstitutionen auf diesem Gebiet ist ein weiteres Ziel des skizzierten Vorhabens. Die Nachwuchsförderung und der resultierende Kompetenzerhalt sollen mit dem geplanten Forschungsprojekt gestützt werden. Die kontinuierliche inhaltliche Einbindung in internationale Vorhaben und Verbünde stellt die wissenschaftlich-technische Aktualität auf dem Gebiet der Radio(geo)chemie und nuklearen Entsorgung auch im nationalen Rahmen sicher. Dafür sind im Rahmen dieses Verbundprojektes gemeinsam mit der Lomonossow-Universität (Moskau) Aufenthalte junger Wissenschaftler an Institutionen in Europa und Russland mit Fokus auf deren Karriereentwicklung durch aktive Teilnahme an Tagungen und Seminaren geplant.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Mineralogisch-geochemische und oberflächenanalytische Charakterisierung der Kluft- und Störungsoberflächen
- AP2: Heterogene Oberflächenreaktivität: Experimentelle und numerische Untersuchungen zur Sorptionseffizienz
- AP3: Parametrisierung und Validierung der reaktiven Transportmodelle, basierend auf experimenteller Analyse des Transportverhaltens und der Oberflächenreaktivität
- AP4: Nachwuchsförderung und internationaler Austausch

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Eine Beprobung fand für Gesteine des Lausitzer Blocks gemeinsam mit der AG Angewandte Geologie (FSU Jena) statt. Dazu wurden drei aktive Steinbrüche ausgewählt und Probenmaterial gesammelt. Der Fokus der Beprobung lag auf Kluft- und Störungszonen mit makroskopischen Hinweisen auf Alterationsprozesse (Verwitterung, hydrothermale Überprägung) des Nebengesteins. Besonders geeignet erscheint das Probenmaterial vom Granodioritsteinbruch Königsbrück. Mehrere bilaterale Onlinetreffen mit der FSU Jena wurden für die konkrete Planung der Beprobung durchgeführt und im Nachgang für die Planung der Aufbereitung, Präparation des Probenmaterials sowie der weiteren Analytik.

Die Besetzung der Doktorandenstelle ist zum Jahresende erfolgt und in einer Einarbeitungsphase wurden vorhandene computertomografische Datensätze geklüfteter Materialien ausgewählt, um numerische Sensitivitätsstudien durchzuführen. Hier lag der Schwerpunkt auf dem Einfluss von Aperturweitenvariationen und kleinskaligen Veränderungen der Kluft-/ Störungsfächentopografie. Dazu wurden Transportmodelle erstellt und der Einfluss der Parametervariabilität quantitativ ausgewertet.

4. Geplante Weiterarbeiten

Oberflächenanalytische Untersuchungen an beprobten Kluft- und Störungsflächen sind als nächster Arbeitsschritt geplant. Diese Geometriedaten dienen dann als Grundlage für die Fortsetzung und Erweiterung der numerischen Arbeiten zum Transport. In einem weiteren Arbeitsschritt soll die Bandbreite der Topografie- und Porositätsveränderungen durch Alterationsprozesse quantifiziert werden. Ihr Einfluss auf die Transporteigenschaften wird quantitativ in Transportmodellen untersucht.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Friedrich-Schiller-Universität Jena, Fürstengraben 1, 07743 Jena		Förderkennzeichen: 02 E 11911B
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Vorhersage der heterogenen Radionuklidsorption auf Kluft- und Störungsflächen in granitischen Gesteinen: Parametrisierung und Validierung verbesserter reaktiver Transportmodelle (WTZ-Granit), Teilprojekt B		
Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte, Feld: 2.3		
Laufzeit des Vorhabens: 01.04.2021 bis 31.03.2024	Berichtszeitraum: 01.07.2021 bis 31.12.2021	
Gesamtkosten des Vorhabens: 249.905,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Schäfer	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Übergeordnetes Ziel des Verbundprojektes ist die Erarbeitung einer verallgemeinerungsfähigen Parametrisierung reaktiver Transportmodelle in geklüfteten Kristallingesteinen. Diese Parametrisierung soll es erlauben, den quantitativen Einfluss der Mikrometer- und Submikrometerrauhheit von Kluft- und Störungsflächen in kristallinen Wirtsgesteinen in reaktiven Transportmodellen zu berücksichtigen. Die Anwendung dafür liegt in der verbesserten Vorhersagbarkeit von Radionuklidmigration und -rückhalt in Simulationsrechnungen.

Die Verbesserung der Zusammenarbeit zwischen deutschen und russischen universitären und außeruniversitären Forschungsinstitutionen auf diesem Gebiet ist ein weiteres Ziel des skizzierten Vorhabens. Die Nachwuchsförderung und der resultierende Kompetenzerhalt sollen mit dem geplanten Forschungsprojekt gestützt werden. Die kontinuierliche inhaltliche Einbindung in internationale Vorhaben und Verbünde stellt die wissenschaftlich-technische Aktualität auf dem Gebiet der Radio(geo)chemie und nuklearen Entsorgung auch im nationalen Rahmen sicher. Dafür sind im Rahmen dieses Verbundprojektes gemeinsam mit der Lomonossow-Universität (Moskau) Aufenthalte junger Wissenschaftler an Institutionen in Europa und Russland mit Fokus auf deren Karriereentwicklung durch aktive Teilnahme an Tagungen und Seminaren geplant.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Mineralogisch-geochemische und oberflächenanalytische Charakterisierung der Kluft- und Störungsoberflächen
- AP2: Heterogene Oberflächenreaktivität: Experimentelle und numerische Untersuchungen zur Sorptionseffizienz
- AP3: Parametrisierung und Validierung der reaktiven Transportmodelle, basierend auf experimenteller Analyse des Transportverhaltens und der Oberflächenreaktivität
- AP4: Nachwuchsförderung und internationaler Austausch

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Die Anstellung von Doktoranden bei den deutschen Projektpartnern war erfolgreich. So nahm Annemie Kusturica im Juli 2021 ihre Arbeit an der FSU auf. Im Dezember 2021 konnte Wenyu Zhou nach einiger Verzögerung, die sich durch Schwierigkeiten bei der Visum-Beantragung ergaben, seine Arbeit am HZDR aufnehmen. Am 10.12.2021 fand ein bilaterales online Meeting zwischen den Partnern der Friedrich-Schiller-Univ. Jena (FSU, T. Schäfer, A. Kusturica) und HZDR (C. Fischer, W. Zhou) statt, bei dem der Zwischenstand des Projekts und die folgenden Experimente besprochen wurden. Vom Projektpartner FSU wurden Untersuchungen zur Petrografie Kristalliner Gesteine aus dem Lausitzer Block vorgestellt.

- AP1: Im August und Dezember 2021 wurden Probenahme-Kampagnen in den Steinbrüchen Meißen, Oberottendorf und Königsbrück durchgeführt. Die Proben wurden für die derzeit laufende dünnschliffpetrografischen und geochemischen (μ XRF, Raman Spektroskopie, Totalaufschluss) Untersuchungen präpariert. Anhand von Bohrkernen ($\varnothing=0,6 - 2,3$ cm) wurden erste geometrische Untersuchungen mittels μ CT durchgeführt, die der Beschreibung des Porenraums und 3-dimensionalen Mineralverteilung auf μ m Skala dienen. Parallel zur Charakterisierung der Proben wurde mit der Planung von Experimenten zur Bestimmung von Diffusions- und Sorptionsparametern begonnen.
- AP4: Ein Abstract wurde zur Fachsektion Hydrogeologie-DGGV Tagung in Jena im März 2022 zu den bisherigen Studien zur Oberflächensorption von Radionukliden und natürlicher Homologe mit dem Titel "LA-ICP-MS imaging on secondary mineral phases as tool to derive palaeohydrological fluctuations and estimate radionuclide retention in future scenarios: A case study from Granitoid Rocks (Sweden)" eingereicht.

4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1: Im ersten Halbjahr 2022 sollen die petrografischen und geochemischen Untersuchungen des Lausitzer Blocks finalisiert werden. Dabei werden oberflächenanalytischen Methoden wie z. B. REM und LA-ICP-MS sowie Porositäts- und Permeabilitätsmessungen zur Anwendung kommen. Des Weiteren ist die Vergrößerung des Probensatzes durch kristalline Gesteine des Erzgebirges sowie der Austausch von Proben mit den Russischen Projektpartnern geplant.
- AP2: In Kooperation zwischen FSU und HZDR wird die Bestimmung der Oberflächenrauigkeit auf der nm- μ m Skala mittels VSI zur Bestimmung mineralspezifischen Rauigkeits-Ausgangswerte erfolgen. Diese Referenzwerte werden mit den 3D-Information der μ CT Verschnitten und dienen als Grundlage für erste Reaktions- und Transportmodellierungen. Die experimentelle Überprüfung dieser Modelle durch Diffusions- und Sorptionsexperimente wird im ersten Halbjahr 2022 konzeptionell begonnen.

5. Berichte, Veröffentlichungen

geplant: Kusturica, A., van Laaten, N., Drake, H., Schäfer, T. (2021): LA-ICP-MS analysis of trace and rare earth elements in carbonate fracture fillings from Granitoid Rocks (Sweden), Environ. Sci. Technol.; to be submitted

Zuwendungsempfänger: Forschungszentrum Jülich GmbH, Wilhelm-Johnen-Str., 52428 Jülich		Förderkennzeichen: 02 E 11921A
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Untersuchungen zur SEParation von AMericium aus hochradioaktiven Abfalllösungen (SEPAM), Teilprojekt A		
Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte, Feld: 2.1		
Laufzeit des Vorhabens: 01.04.2021 bis 31.03.2024	Berichtszeitraum: 01.07.2021 bis 31.12.2021	
Gesamtkosten des Vorhabens: 254.678,00 EUR	Projektleiter: Dr. Modolo	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Gesamtziel des beantragten Projektes „Untersuchungen zur SEParation von AMericium aus hochradioaktiven Abfalllösungen (SEPAM)“ ist die wissenschaftliche Untersuchung und Weiterentwicklung von Extraktionsprozessen sowie der grundlegenden Chemie zur Abtrennung von Americium aus hochradioaktiven Abfällen. Ein weiterer wesentlicher Aspekt des Projektes ist die Ausbildung und Förderung des wissenschaftlichen Nachwuchses im Bereich der Nuklearen Sicherheitsforschung und Nuklearchemie im Allgemeinen und in Themen der Actinidenchemie im Besonderen. Durch eine internationale Ausrichtung des Projekts werden aktuelle Entwicklungen im Ausland berücksichtigt. Somit leistet das Projekt einen wichtigen Beitrag zum Aufbau, der Weiterentwicklung und dem Erhalt wissenschaftlich-technischer Kompetenz in der nuklearen Sicherheitsforschung.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Das Projekt wird in vier Arbeitspaketen bearbeitet:

- AP1: Grundlagen Koordinations- und Extraktionschemie
- AP2: Prozessrelevante Optimierungen
- AP3: Modellierung und Prozesstests
- AP4: Nachwuchsförderung

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1: In Zusammenarbeit mit der Universität Twente in den Niederlanden wurde eine Reihe von Diglycolamid-Analoga mit verschiedenen Diastereomeren getestet, um die Fähigkeit zur Komplexbildung und Selektivität für Actinide, Lanthanide und andere Spaltprodukte zu beobachten.

Die organischen und wässrigen Lösungen wurden mittels Gamma- und Alpha-Spektrometrie sowie ICP-MS gemessen. Insgesamt sind die Verteilungsverhältnisse für die interessierenden Elemente, wie erwartet, niedrig. Dennoch zeigte die Ethyl-Methyl-Substitution in beiden Analoga höhere Verteilungsverhältnisse für Am. Der Einfluss der Stereochemie muss weiter untersucht werden.

AP2: Im Berichtszeitraum wurden keine Arbeiten durchgeführt.

AP3: Im Berichtszeitraum wurden keine Arbeiten durchgeführt.

AP4: Im September 2021 wurde eine Doktorandin zur Bearbeitung des SEPAM Projekts eingestellt, die bereits an einem Projekttreffen am 10.12.2021 teilgenommen und erste Ergebnisse präsentiert hat.

4. Geplante Weiterarbeiten

Andere, von der Lomonossow-Universität und dem KIT bereitgestellten Liganden werden getestet, um die für Prozessentwicklungsstudien am besten geeigneten auszuwählen. Die Teilnahme an verschiedenen Konferenzen und Präsentation der Ergebnisse ist geplant.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Hermann-von-Helmholtz-Platz 1, 76344 Eggenstein-Leopoldshafen		Förderkennzeichen: 02 E 11921B
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Untersuchungen zur SEParation von AMericium aus hochradioaktiven Abfalllösungen (SEPAM), Teilprojekt B		
Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte, Feld: 2.1		
Laufzeit des Vorhabens: 01.04.2021 bis 31.03.2024	Berichtszeitraum: 01.07.2021 bis 31.12.2021	
Gesamtkosten des Vorhabens: 250.000,00 EUR	Projektleiter: Dr. Geist	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Gesamtziel des beantragten Projektes „Untersuchungen zur SEParation von AMericium aus hochradioaktiven Abfalllösungen (SEPAM)“ ist die wissenschaftliche Untersuchung und Weiterentwicklung von Extraktionsprozessen sowie der grundlegenden Chemie zur Abtrennung von Americium aus hochradioaktiven Abfällen. Ein weiterer wesentlicher Aspekt des Projektes ist die Ausbildung und Förderung des wissenschaftlichen Nachwuchses im Bereich der Nuklearen Sicherheitsforschung und Nuklearchemie im Allgemeinen und in Themen der Actinidenchemie im Besonderen. Durch eine internationale Ausrichtung Projekts werden aktuelle Entwicklungen im Ausland berücksichtigt. Somit leistet das Projekt einen wichtigen Beitrag zum Aufbau, der Weiterentwicklung und dem Erhalt wissenschaftlich-technischer Kompetenz in der nuklearen Sicherheitsforschung.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Grundlagen Koordinations- und Extraktionschemie
- AP2: Prozessrelevante Optimierungen
- AP3: Modellierung und Prozesstests
- AP4: Nachwuchsförderung

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Für die Komplexierung von Am(III) mit neuen wasserlöslichen N-Donorliganden nach dem CHON-Prinzip lag der Fokus auf kationischen Bis-triazinyl-pyridinen und Bis-triazinyl-bipyridinen. Die kationische Ladung wird dabei durch Protonierung im sauren Medium erreicht. Diese Liganden sollten eine optimale Wasserlöslichkeit gewährleisten und zudem zum Vergleich der Eigenschaften von anionischen, neutralen und kationischen Liganden dienen.

Die Herausforderung besteht hier im Zugang geeigneter 1,2-Diketone für den letzten Schritt der Synthese der Liganden. Es konnten zwar bereits Derivate wie N¹,N¹,N²,N²-Tetraisopropylloxalamid hergestellt werden. Diese zeigten sich jedoch als nicht reaktiv genug, um den gewünschten Liganden zu bilden. Andere Vertreter wie 1,4-Bis(diethylamino)butan-2,3-dion sind zurzeit noch nicht zugänglich, da die direkte Reaktion zwischen 1,4-Dibromobutan-2,3-dion und Aminen, hauptsächlich Diethylamin, nicht zu den gewünschten 1,2-Diketonen, sondern zu nicht identifizierbaren Produkten führte. 1,4-Dibromobutan-2,3-dion mittels Methanol oder Monoethylenglykol zu schützen führte bisher zu keinem Ergebnis. Zurzeit liegt der Fokus auf der Reaktion zwischen 1,4-Dibromobutan-2-en und Diethylamin, der anschließenden Dihydroxylierung mit Kaliumpermanganat und der abschließenden Oxidation zum 1,2-Diketon.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP1: Die Synthese der kationischen Bis-triazinyl-pyridin- und Bis-triazinyl-bipyridin-derivate wird fortgesetzt.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Rheinisch-Westfälische Technische Hochschule Aachen		Förderkennzeichen: 02 E 11931
Vorhabensbezeichnung: Einfluss der thermischen Reife auf die gekoppelten hydro-mechanischen Eigenschaften niedrig-durchlässiger Tonsteine - Feld & Laborskala (Maturity)		
Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit Bereich C1: Standortauswahl, Feld: 1.2		
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2021 bis 30.06.2025	Berichtszeitraum: 01.07.2021 bis 31.12.2021	
Gesamtkosten des Vorhabens: 1.299.689,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Amann	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Für den ersten Projektteil bestehen die folgenden 4 Hauptvorhabensziele:

- Die Festlegung von fünf geeigneten Bohrlokationen, an denen die Zielformation (das Pliensbachium) in etwa 30 m Tiefe vorliegt. Die Lokationen sollen zudem so verteilt sein, dass das Pliensbachium in unterschiedlichen thermischen Reifen von unreif bis reif (Ölfenster) vorliegt.
- Nach der Festlegung von aus geologischer Sicht geeigneten Positionen, sollen die entsprechenden Landeigentümer kontaktiert werden, um Gestattungsverträge zur Durchführung der Bohrarbeiten auszuhandeln.
- Die Ausschreibung für die Bohrarbeiten soll veröffentlicht werden.
- Die Ausschreibung für die „Bohrloch-Completion“ soll veröffentlicht werden.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Basierend auf den 4 oben genannten Vorhabenszielen ergeben sich folgende Arbeitspakete:

- Auswertung von Literatur und Datenbanken zur Einschätzung der geologischen Verhältnisse und Vorauswahl geeigneter Lokationen.
- Geländearbeit (Kartieren und Einfallwerte von Aufschlüssen bestimmen) zum Abgleich mit Literatur und Datenbanken sowie Ortsbegehung der gewählten Lokationen um diese auf Durchführbarkeit zu überprüfen.
- Kontaktieren der Landeigentümer und Verhandlungen der Gestattungsverträge.
- Aufsetzen Ausschreibung Bohrarbeiten.
- Aufsetzen Ausschreibung „Bohrloch-Completion“.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im Folgenden sind die Ergebnisse der in Punkt 2 genannten Arbeitspakete aufgelistet:

- Fünf geologisch geeignete Lokationen wurden festgelegt:
Lokation BO 1.0: südwestlich von Lamspringe, erwartete thermische Reife: unreif
Lokation BO 2.0: nordöstlich von Wickensen, erwartete thermische Reife: unreif-frühreif
Lokation BO 3.0: östlich von Dielmissen, erwartete thermische Reife: frühreif
Lokation BO 4.0: nördlich von Harderode, erwartete thermische Reife: Anfang Ölfenster
Lokation BO 5.0: südöstlich von Bensen, erwartete thermische Reife: Ende Ölfenster
- Für alle 5 Lokationen wurden Plätze gefunden, welche prinzipiell die Durchführung der Bohrarbeiten ermöglichen würden.
- Die Eigentümer aller 5 Lokationen wurden ermittelt, allerdings wurde nur von dreien bisher eine mündliche Zusage erteilt. Zwei Eigentümer haben die geplanten Bohrarbeiten nicht gestattet, so dass Alternativen gesucht werden müssen.
- Die Ausschreibung der Bohrungen wurde am 12.01.2022 veröffentlicht und läuft bis zum 11.02.2022.
- Die Ausschreibung der „Bohrloch-Completion“ ist weitestgehend fertig.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Mit den drei Eigentümern, die bereits mündlich zugesagt haben, sind Ortsbegehungen für Anfang Februar geplant. Im Anschluss sollen die Gestattungsverträge unterzeichnet werden.
- Für die zwei abgelehnten Lokationen wird nach alternativen Bohrplätzen gesucht.
- Die Auswahl der Bohrfirma soll bis 16.02. erfolgen.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 11941	
Vorhabensbezeichnung: Wissenschaftliche Grundlagen zum Nachweis der Langzeitsicherheit von Endlagern (WiGru-9)			
Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit Bereich C3: Sicherheitsnachweis, Feld: 3.2			
Laufzeit des Vorhabens: 01.05.2021 bis 30.09.2023		Berichtszeitraum: 01.07.2021 bis 31.12.2021	
Gesamtkosten des Vorhabens: 1.113.891,65 EUR		Projektleiter: Dr. Noseck	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Im Rahmen des Vorhabens werden die wissenschaftlichen Ergebnisse von experimentellen und theoretischen FuE-Vorhaben im Hinblick auf ihre Berücksichtigung in Modellvorstellungen und Modelldaten für Langzeitsicherheitsanalysen ausgewertet. Beantragte und laufende FuE-Arbeiten 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 und zur Weiterentwicklung von Strategien und methodischen Vorgehensweisen bei einem Safety Case inklusive Kommunikation und Wissenserhalt und Einbringung nationaler Interessen in internationale Aktivitäten, insbesondere durch Mitarbeit in internationalen Arbeitsgruppen der OECD/NEA.
- 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

- Vergleich der Ansätze und Herangehensweisen verschiedener Länder zur Bewertung der Langzeitsicherheit von Endlagern und Weiterentwicklung der eigenen Ansätze. Schwerpunkte sind Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen, Benchmark-Rechnungen sowie die Erstellung State-of-the-art-Berichten für Endlager in Salzformationen.
- Modellentwicklung zur Bentonitaufsättigung und Untersuchung der Auswirkungen von Permafrost auf Strömungsvorgängen in geklüfteten Medien mit Laborexperimenten und begleitenden Modellrechnungen.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

TA1:

- Teilnahme am virtuellen Jahrestreffen der IGSC. Teilnahme an Treffen der IGSC Core Group und der Umfrage zur zukünftigen Ausrichtung der IGSC. Erstellung des IGSC End-

of-Term Reports und Vorbereitung der Präsentation für die RWMC Bureau-Sitzung als neuer IGSC Chair.

- Teilnahme an Sitzungen der IDKM und EGAR-Bureaus, an den Arbeitstreffen von EGAR sowie an der IDKM Topical Session zum Thema IDKM Timescales mit Leitung einer Break-out-Session. Organisation und Durchführung von Arbeitstreffen der SER Arbeitsgruppe im Rahmen von EGAR.
- Leitung des CRC Bureau Meetings (Online), Vorbereitung des CRC-5 Plenary Meetings 2022 in Dresden, Abstimmung des Program of Work (PoW) 2023 - 2024.

TA2:

- Planung und Beginn weiterführender Arbeiten zur Analyse von Modellsystemen verschiedener Länder im Rahmen der gemeinsamen Aktivität zur Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse (JOSA); Untersuchungen mit verschiedenen Methoden der Sensitivitätsanalyse (PAWN, BSPCE).
- Durchführung von Vergleichsrechnungen für ein Endlager im Salzgestein sowie ein Endlager im Tongestein im internationalen Vorhaben DECOVALEX 2023, Task F.
- Weiterarbeit am State-of-the-art-Bericht zu Szenarien in Salzgestein mit SNL, COVRA, RWM und BGETEC.
- Die Arbeiten zur Portierung des nichtisothermen VIPER-Konzepts nach COMSOL wurden aufgenommen.
- Optimierung des experimentellen Aufbaus für die Einfrierversuche unter Einbeziehung eines geeigneteren Equipments zur Kühlung.

4. Geplante Weiterarbeiten

TA1:

- Teilnahme am RWMC Bureau Meeting, Leitung der IGSC Core Group Treffen und Teilnahme an der gemeinsamen Topical Session mit FSC zum Thema Uncertainties.
- Teilnahme an Sitzungen der IDKM und EGAR-Bureaus, an den Arbeitstreffen von EGAR sowie am 2. IDKM Plenary Meeting mit Vorstellung der Arbeiten zum SER.
- Planung und Durchführung des CRC-5 Plenary Meetings 2022 in Dresden, Weiterführung der Arbeiten gemäß PoW 2021-2022.

TA2:

- Weiterführung der Analyse von Modellsystemen verschiedener Länder im Rahmen der gemeinsamen Aktivität zur Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse (JOSA). Anwendung von verschiedenen Methoden der Sensitivitätsanalyse auf komplexere Modellsysteme. Auswertung und Diskussion von Ergebnissen im internationalen Kreis.
- Weiterführung von Vergleichsrechnungen für ein Endlager im Salzgestein sowie ein Endlager im Tongestein im internationalen Vorhaben DECOVALEX 2023.
- Fortsetzung der VIPER-Portierung und Teilnahme am virtuellen Meeting der Task Force EBS im Februar 2022.
- Wiederaufnahme der Einfrierversuche in einem geräumigen Klimaschrank nebst zugehörigen Beschaffungen.
- Zur Überprüfung der Methodik zum Import geologischer Daten wird ein erstes Prinzipmodell zum Standort Drenthe erstellt.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 11951A	
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Kompaktion von Salzgrus für den sicheren Einschluss - Phase 2 (KOMPASS II), Teilprojekt A			
Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte, Feld: 2.3			
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2021 bis 30.06.2023		Berichtszeitraum: 01.07.2021 bis 31.12.2021	
Gesamtkosten des Vorhabens: 298.800,00 EUR		Projektleiter: Friedenberg	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Gesamtziel des Vorhabens ist die Weiterverfolgung der in dem Vorgängerprojekt KOMPASS-I entwickelten Methoden und Strategien für die Reduzierung der Defizite bei der Prognose des Kompaktionsverhaltens von Salzgrus als Versatz in einem Endlager. Damit sollen die Voraussetzungen für eine Stärkung des Sicherheitsnachweises für ein Endlager im Steinsalz geschaffen werden. Dies beinhaltet die Schaffung und Weiterentwicklung experimenteller Grundlagen für die Bestimmung von Salzgruseigenschaften im Bereich kleiner Porositäten, die Entwicklung des Prozessverständnisses und die Entwicklung modelltechnischer Strategien zur Ermöglichung einer belastbaren Prognose der Salzgruskompaktion im Hinblick auf den sicheren Einschluss.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP1: Experimentelle Untersuchungen

Im Rahmen des Vorgängerprojekts KOMPASS-I wurden erfolgreich zwei Vorkompaktionsmethoden entwickelt, mit denen eine Herstellung von Probekörpern mit einer Porosität < 20 % in kurzer Zeit und unter in-situ relevanten Spannungsbedingungen möglich ist. In (AP1.1) sollen diese Vorkompaktionsmethoden weiterentwickelt werden und es wird angestrebt reproduzierbare und vorhersagbare Beziehungen zwischen Spannung, Zeitdauer, Feuchtegehalt des Salzgruses und Zielporosität herzustellen. Für die Langzeitsicherheit des Salzgrusversatzes ist die Kenntnis der Permeabilitäts-Porositätsbeziehung unabdingbar. Hierzu sind in (AP1.2) systematische Untersuchungen der hydraulischen Eigenschaften des kompaktierenden Salzgruses geplant. Diese werden teilweise parallel zu den in (AP1.3) stattfindenden Langzeitkompaktionsversuchen stattfinden. Die langzeitlichen Versuche sind auf die isolierte Betrachtung einzelner das THM-gekoppelte Kompaktionsverhalten beeinflussender Faktoren ausgerichtet und folgen dem in KOMPASS-I entwickeltem Laborprogramm.

AP2: Mikrostrukturelle Untersuchungen

Innerhalb von KOMPASS-I wurden mikrostrukturelle Methoden so weit vorangetrieben, dass eine Verknüpfung von Deformationsmechanismen und Kompaktion möglich ist. Ziele der mikrostrukturellen Untersuchungen sind zum einen in (AP2.1) der Vergleich der Kornstruktur von experimentell vorkompaktierten Probekörpern mit in-situ kompaktiertem Material und somit die Verifizierung der Vorkompaktionsmethoden sowie in (AP2.2) die Untersuchung von langzeitlich kompaktiertem Salzgrus. In (AP2.3) soll zudem der Einfluss von Feuchtigkeit auf das Kompaktionsverhalten untersucht werden.

AP3: Numerische Modellierung

In KOMPASS-I wurde ein systematischer Vergleich von Stoffmodellen für die Beschreibung des Salzgrusverhaltens erstellt. Ein erstes Benchmarking von 3 Triaxialversuchen, zeigte außerdem, dass weiterhin Entwicklungsbedarf bei der modelltheoretischen Abbildung des Kompaktionsverhaltens besteht. Hierzu werden in (AP3.1) zunächst Benchmarkrechnungen der Laborexperimente aus (AP1.3) durchgeführt, wodurch die Möglichkeit der Abbildung des isolierten Parameters untersucht wird. Auf dieser Basis werden die Modelle in (AP3.2) verbessert und optimiert. Zum Aufzeigen der in dem Projekt erreichten numerischen Fortschritte wird in (AP3.3) ein Demonstrator simuliert, welcher eine generische mit Salzgrus verfüllte Strecke in einem Endlager im Steinsalz umfasst. Mit der Definition von Anforderungen an die numerischen Modelle mit Blick auf die Langzeitsicherheit wird in (AP3.4) eine Verknüpfung zur langzeitlichen Sicherheitsbetrachtung gezogen.

AP4: Dokumentation und Synthese

In AP4 werden die Ergebnisse der übrigen Arbeitspakete dokumentiert und zusammengefasst sowie die Richtung für die systematische Lösung der verbleibenden Fragen festgelegt.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im Berichtszeitraum konnte am 14.09.2021 ein physisches Kick-off Meeting in Braunschweig stattfinden. In diesem Gespräch wurde von den „alten“ Projektpartnern der jeweils aktuelle Stand der Arbeiten zu KOMPASS vorgestellt. Als „neuen“ Projektpartnern durften die COVRA in Kooperation mit der Utrecht Universität begrüßen, welche einen Einblick in ihre Salzgrusforschungen gaben. Außerdem waren die Kollegen des SAVER-Projekts eingeladen und es wurde über die Kooperation der Projekte KOMPASS und SAVER gesprochen.

Am 23.11.2021 und 24.11.2021 fand virtuell das zweite KOMPASS-II Meeting in Kombination mit einem SAVER/KOMPASS Workshop auf nationaler Ebene statt. Die Trennung von nationalen und internationalen Partnern für das zweite Meeting wurde aufgrund der sprachlichen Vereinfachung vor allem für die Planung der Zusammenarbeit mit den SAVER-Kollegen getroffen. Am 09.12.2021 fand ein virtuelles Meeting mit allen Partnern statt, indem die internationalen Partner aktualisierte Informationen erhielten und die Utrecht Universität Möglichkeiten zur Mitarbeit vorstellten.

Die GRS als Projektkoordinator war für die Organisation und Durchführung der Meetings verantwortlich.

4. Geplante Weiterarbeiten

Bearbeitung der einzelnen APs entsprechend der Vorhabenbeschreibung.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Das KOMPASS-Projekt wurde im Rahmen der vom BASE organisierten SafeND als Poster vorgestellt und im Konferenzband online veröffentlicht.

Auftragnehmer: BGE Technology GmbH, Eschenstr. 55, 31224 Peine		Förderkennzeichen: 02 E 11951B	
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Kompaktion von Salzgrus für den sicheren Einschluss - Phase 2 (KOMPASS II), Teilprojekt B			
Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte, Feld: 2.3			
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2021 bis 30.06.2023		Berichtszeitraum: 01.07.2021 bis 31.12.2021	
Gesamtkosten des Vorhabens: 263.890,83 EUR		Projektleiter: Lerch	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Gesamtziel des Vorhabens ist die Weiterverfolgung der in dem Vorgängerprojekt KOMPASS-I entwickelten Methoden und Strategien für die Reduzierung der Defizite bei der Prognose des Kompaktionsverhaltens von Salzgrus als Versatz in einem Endlager. Damit sollen die Voraussetzungen für eine Stärkung des Sicherheitsnachweises für ein Endlager im Steinsalz geschaffen werden. Dies beinhaltet die Schaffung und Weiterentwicklung experimenteller Grundlagen für die Bestimmung von Salzgruseigenschaften im Bereich kleiner Porositäten, die Entwicklung des Prozessverständnisses und die Entwicklung modelltechnischer Strategien zur Ermöglichung einer belastbaren Prognose der Salzgruskompaktion im Hinblick auf den sicheren Einschluss.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP1: Experimentelle Untersuchungen

Im Rahmen des Vorgängerprojekts KOMPASS-I wurden erfolgreich zwei Vorkompaktionsmethoden entwickelt, mit denen eine Herstellung von Probekörpern mit einer Porosität < 20 % in kurzer Zeit und unter in-situ relevanten Spannungsbedingungen möglich ist. In (AP1.1) sollen diese Vorkompaktionsmethoden weiterentwickelt werden und es wird angestrebt reproduzierbare und vorhersagbare Beziehungen zwischen Spannung, Zeitdauer, Feuchtegehalt des Salzgruses und Zielporosität herzustellen. Für die Langzeitsicherheit des Salzgrusversatzes ist die Kenntnis der Permeabilitäts-Porositätsbeziehung unabdingbar. Hierzu sind in (AP1.2) systematische Untersuchungen der hydraulischen Eigenschaften des kompaktierenden Salzgruses geplant. Diese werden teilweise parallel zu den in (AP1.3) stattfindenden Langzeitkompaktionsversuchen stattfinden. Die langzeitlichen Versuche sind auf die isolierte Betrachtung einzelner das THM-gekoppelte Kompaktionsverhalten beeinflussender Faktoren ausgerichtet und folgen dem in KOMPASS-I entwickeltem Laborprogramm.

AP2: Mikrostrukturelle Untersuchungen

Innerhalb von KOMPASS-I wurden mikrostrukturelle Methoden so weit vorangetrieben, dass eine Verknüpfung von Deformationsmechanismen und Kompaktion möglich ist. Ziele der mikrostrukturellen Untersuchungen sind zum einen in (AP2.1) der Vergleich der Kornstruktur von experimentell vorkompaktierten Probekörpern mit in-situ kompaktiertem Material und somit die Verifizierung der Vorkompaktionsmethoden sowie in (AP2.2) die Untersuchung von langfristig kompaktiertem Salzgrus. In (AP2.3) soll zudem der Einfluss von Feuchtigkeit auf das Kompaktionsverhalten untersucht werden.

AP3: Numerische Modellierung

In KOMPASS-I wurde ein systematischer Vergleich von Stoffmodellen für die Beschreibung des Salzgrusverhaltens erstellt. Ein erstes Benchmarking von 3 Triaxialversuchen, zeigte außerdem, dass weiterhin Entwicklungsbedarf bei der modelltheoretischen Abbildung des Kompaktionsverhaltens besteht. Hierzu werden in (AP3.1) zunächst Benchmarkrechnungen der Laborexperimente aus (AP1.3) durchgeführt, wodurch die Möglichkeit der Abbildung des isolierten Parameters untersucht wird. Auf dieser Basis werden die Modelle in (AP3.2) verbessert und optimiert. Zum Aufzeigen der in dem Projekt erreichten numerischen Fortschritte wird in (AP3.3) ein Demonstrator simuliert, welcher eine generische mit Salzgrus verfüllte Strecke in einem Endlager im Steinsalz umfasst. Mit der Definition von Anforderungen an die numerischen Modelle mit Blick auf die Langzeitsicherheit wird in (AP3.4) eine Verknüpfung zur langzeitlichen Sicherheitsbetrachtung gezogen.

AP4: Dokumentation und Synthese

In AP4 werden die Ergebnisse der übrigen Arbeitspakete dokumentiert und zusammengefasst sowie die Richtung für die systematische Lösung der verbleibenden Fragen festgelegt.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Die Arbeiten konzentrierten sich auf AP3.1 und AP3.2. Indem die experimentelle Datenlage (AP1.3) wächst, ist auch innerhalb von AP3.1 von einer zunehmenden Anzahl gleichzeitig handzuhabenden Datenreihen auszugehen. Daher wurde beim Identifikationsprozess damit begonnen, ihn auf seine verwendete Fehlerfunktion zu überprüfen, die Erweiterbarkeit zur Integration zusätzlicher Datenreihen zu verbessern und Änderungen im numerischen Modell zu erleichtern.

Die mikrostrukturellen Ergebnisse und die Ergebnisse der Benchmarkberechnungen der vorangegangenen Projektphase haben gezeigt, dass das verwendete Stoffmodell erweitert werden muss. Mit der Untersuchung eines viskoplastischen Teilstoffmodells wurde begonnen. Erste Ergebnisse zeigen das Potential des Ansatzes, die thermodynamische Konsistenz und damit die Zulässigkeit muss noch geprüft werden.

Im Berichtszeitraum wurde an drei erweitert-internen Meetings teilgenommen. Die Erweiterung erfolgt durch Mitarbeitende des Projektes SAVER. Das Kick-off Meeting fand am 14.09.2021 in Braunschweig statt. Dabei wurde der aktuelle Stand der Arbeiten vorgestellt. Ein zweites Meeting fand am 23./24.11.2021 in Verbindung mit einem SAVER/KOMPASS Workshop statt. Der Schwerpunkt des dritten Meetings am 09.12.2021 lag im Fokus der neuen und internationalen Partner. Weiterhin erfolgten Zuarbeiten im Zusammenhang mit durchgeführten und für 2022 geplanten Veröffentlichungen wie der unten genannten SaveND und SaltMech X.

4. Geplante Weiterarbeiten

Bearbeitung der einzelnen APs entsprechend der Vorhabenbeschreibung.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Das KOMPASS-Projekt wurde im Rahmen der vom BASE organisierten SafeND als Poster vorgestellt und im Konferenzband online veröffentlicht.

Zuwendungsempfänger: IfG Institut für Gebirgsmechanik GmbH, Friederikenstr. 60, 04279 Leipzig		Förderkennzeichen: 02 E 11951C
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Kompaktion von Salzgrus für den sicheren Einschluss - Phase 2 (KOM-PASS II), Teilprojekt C		
Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte, Feld: 2.3		
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2021 bis 30.06.2023	Berichtszeitraum: 01.07.2021 bis 31.12.2021	
Gesamtkosten des Vorhabens: 286.215,20 EUR	Projektleiter: Dr. Popp	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Gesamtziel des Vorhabens ist die Weiterverfolgung der in dem Vorgängerprojekt KOMPASS-I entwickelten Methoden und Strategien für die Reduzierung der Defizite bei der Prognose des Kompaktionsverhaltens von Salzgrus als Versatz in einem Endlager. Damit sollen die Voraussetzungen für eine Stärkung des Sicherheitsnachweises für ein Endlager im Steinsalz geschaffen werden. Dies beinhaltet die Schaffung und Weiterentwicklung experimenteller Grundlagen für die Bestimmung von Salzgruseigenschaften im Bereich kleiner Porositäten, die Entwicklung des Prozessverständnisses und die Entwicklung modelltechnischer Strategien zur Ermöglichung einer belastbaren Prognose der Salzgruskompaktion im Hinblick auf den sicheren Einschluss.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP1: Experimentelle Untersuchungen

Hier erfolgt die Anwendung und Weiterentwicklung der Vorkompaktionsmethoden, die Durchführung von Kompaktionstests (mit begleitenden Durchlässigkeitsmessungen zur Ableitung der Permeabilitäts-Porositätsbeziehung) und Langzeitkompaktionstests.

AP2: Mikrostrukturelle Untersuchungen

Mittels der innerhalb von KOMPASS-I weiterentwickelten mikrostrukturellen Methoden soll ein Vergleich der Kornstruktur von experimentell vorkompaktierten Probekörpern mit in-situ kompaktiertem Material durchgeführt werden sowie der Einfluss von Feuchtigkeit auf das Kompaktionsverhalten untersucht werden.

AP3: Numerische Modellierung

Auf Basis von Benchmark-Untersuchungen sollen die Modelle verbessert und optimiert werden. Zum Aufzeigen der erreichten numerischen Fortschritte wird ein Demonstrator simuliert, welcher eine generische mit Salzgrus verfüllte Strecke in einem Endlager im Steinsalz umfasst. Mit der Definition von Anforderungen an die numerischen Modelle mit Blick auf die Langzeitsicherheit wird eine Verknüpfung zur langzeitlichen Sicherheitsbetrachtung gezogen.

AP4: Dokumentation und Synthese

Abschließend werden die Ergebnisse der übrigen Arbeitspakete dokumentiert und zusammengefasst sowie die Richtung für die systematische Lösung der verbleibenden Fragen festgelegt.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im Berichtszeitraum fanden am 14.09.2021 das Kick-off Meeting in Braunschweig (in Präsenz) sowie am 23.11.2021 und 24.11.2021 das zweite KOMPASS-II Meeting (virtuell) in Kombination mit einem SAVER/KOMPASS Workshop statt. Am 09.12.2021 fand ein virtuelles Meeting mit allen Partnern statt, indem die internationalen Partner aktualisierte Informationen erhielten und die Utrecht Universität Möglichkeiten zur Mitarbeit vorstellten.

In AP1 wurde nach Beschaffung einer neuen Salzgruscharge (von der GSES Sondershausen) in der großen Versatzdruckzelle ein Vorversuch mit befeuchtem Salzgrus durchgeführt. Das Material wurde unter einer nominellen Auflast schrittweise mit ca. 0,5 MPa; 2,0 MPa, 4,0 MPa und 8,0 MPa (je Laststufe 1 Woche Kriechzeit), d. h. bis ca. 4.500 kN definiert konsolidiert wurde, wobei insgesamt eine Endkompaktion von ca. 15 % erreicht wurde.

Zur Durchführung der geplanten Mikrostrukturuntersuchungen in AP2 wurden die im Vorgängervorhaben (mit einer Laufzeit von 200 d) kompaktierten Proben aufbereitet und den Partnern SANDIA und BGR zur Verfügung gestellt. Abhängig vom Feuchtigkeitsanteil liegen unterschiedliche Restporositäten, zwischen 7 – 11 % (trockene Proben) und < 2 % (feuchte Proben) vor.

Weiterhin wurden Restarbeiten zur Inbetriebnahme der neuen Kompaktionszellen zur Bestimmung von Volumenkompaktion und Permeabilität von Salzgrus mit gleichzeitiger Durchschalung durchgeführt. Aktuell erfolgt die Beschaffung des hydraulischen Systems.

Für das AP3 bestand der Beitrag des IfG in der Entwicklung eines virtuellen Demonstrators. Dies ist motiviert durch die positiven Erfahrungen mit dem virtuellen Demonstrator aus den numerischen Arbeiten des Verbundprojekts WEIMOS. Die Modellgeometrie des virtuellen Demonstrators für KOMPASS II ist einer generischen Einlagerungsstrecke aus dem KOSINA Projekt nachempfunden, und wurde als Scheibenmodell in der FEM Software FLAC3D (Fa. Itasca) umgesetzt. Der Demonstrator wird im Januar 2022 den Projektpartnern zur Verfügung gestellt.

4. Geplante Weiterarbeiten

Bearbeitung der einzelnen APs entsprechend der Vorhabenbeschreibung.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Das KOMPASS-Projekt wurde im Rahmen der vom BASE organisierten SafeND als Poster vorgestellt und im Konferenzband online veröffentlicht.

Zuwendungsempfänger: Technische Universität Clausthal, Adolph-Römer-Str. 2a, 38678 Clausthal-Zellerfeld		Förderkennzeichen: 02 E 11951D
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Kompaktion von Salzgrus für den sicheren Einschluss - Phase 2 (KOMPASS II), Teilprojekt D		
Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte, Feld: 2.3		
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2021 bis 30.06.2023	Berichtszeitraum: 01.07.2021 bis 31.12.2021	
Gesamtkosten des Vorhabens: 307.503,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Düsterloh	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Gesamtziel des Vorhabens ist die Weiterverfolgung der in dem Vorgängerprojekt KOMPASS-I entwickelten Methoden und Strategien für die Reduzierung der Defizite bei der Prognose des Kompaktionsverhaltens von Salzgrus als Versatz in einem Endlager.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP1: Vorkompaktionsversuche

Durchführung systematischer Versuchsreihen zur Vorkompaktion von Salzgrus unter der Zielstellung, funktionale Abhängigkeiten zwischen Porosität einerseits und Kompaktionsspannung, Kompaktionstemperatur, Kompaktionsdauer und Salzgrusfeuchte andererseits zu generieren.

AP2: Triaxialversuche

Durchführung von Triaxialversuchen an vorkompaktierten Salzgrusprüfkörpern unter der Zielstellung, das unter triaxialer Beanspruchung resultierende Kompaktionsverhalten in Raum und Zeit unter Berücksichtigung des Einflusses der Porosität auf das viskose Kompaktionsverhalten im Bereich niedriger Porositäten (< 5 %), des Einflusses der Porosität auf das viskose Kriechverhalten, des Einflusses der deviatorischen Spannung auf das Kompaktionsverhalten und des Einflusses der Temperatur auf das Kompaktionsverhalten zu quantifizieren.

AP3: Numerische Simulationen

Weiterentwicklung eines Stoffmodells und numerische Simulationen zur Backanalysis von Laborversuchen aus AP2 zur Weiterentwicklung, Verifikation und Validation des Stoffmodells, Benchmark-Berechnungen zur vergleichenden Analyse der Prädiktionsqualität von Berechnungen zur Kompaktion von Salzgrus unter Anwendung des Stoffmodells und Sensitivitätsanalysen zum Kompaktionsverhalten von Salzgrus anhand eines generischen Modells (virtueller Demonstrator)

AP4: Schlussbericht

In AP4 werden die Ergebnisse der übrigen Arbeitspakete dokumentiert und zusammengefasst sowie die Richtung für die systematische Lösung der verbleibenden Fragen festgelegt.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1: Herstellung von vier vorkompaktierten Proben mit angestrebter Endporosität von 16 %-19 %, vorgegebenem Feuchtegehalt von $w = 0,1$ % und einer Probenendgröße von $D/H=50$ mm/100 mm für Langzeitkompaktionsuntersuchungen und Übergabe an den Projektpartner GRS.

Durchführung von 8 Vorkompaktionsversuchen an Proben mit Körnung entsprechend Fullerkurve (Fullerkurve durch Siebung und Mischung hergestellt)

Durchführung von 3 Vorkompaktionsversuchen mit Variation der Versuchsdauer an Proben mit Feuchtegehalt $w = 0,1$ % und Belastungsniveau $\sigma_m = 3$ MPa

AP2: Fortsetzung von Versuch TUC-V2-Phase 1 mit folgenden Belastungsphasen:

TUC-V2 Phase 2: Dauer: 150 d, Belastung: isotropes Niveau (20 MPa) mit zyklischen Phasen deviatorischer Beanspruchung bei jeweils gleichem Belastungsniveau (8 MPa), Zielsetzung: Isolierte Untersuchung des Einflusses der deviatorischen Belastung auf das Kompaktionsverhalten sowie des Einflusses der Porosität auf das Kriechverhalten von Salzgrus;

TUC-V2 Phase 3: Dauer: 150 d, Belastung: isotropes Niveau (20 MPa), Zielsetzung: Untersuchung des Langzeitverhaltens unter konstanten isotropen Bedingungen bis in den Bereich niedriger Porositäten kleiner 7 %;

TUC-V2 Phase 4: Dauer: 150 d, Belastung: isotropes Niveau (20 MPa) mit drei thermischen Belastungsstufen (30 °C/50 °C/70 °C), Zielsetzung: Isolierte Untersuchung des Einflusses der thermischen Belastung auf das Kompaktionsverhalten von Salzgrus;

TUC-V2 Phase 5: Dauer: 150 d, Belastung: Reaktivierung der Kompaktionsrate in der zeitlichen Abfolge der deviatorischen (8 MPa), isotropen (24 MPa) und thermischen (70 °) Belastung, Zielsetzung: Erhöhung der Untersuchungsbereiche/Gültigkeitsbereiche für alle in den vorhergehenden Phasen (1 - 4) untersuchten Einflussfaktoren: deviatorische Belastung, isotrope Belastung, thermische Belastung, Porosität.

- AP3: Entwicklung eines neuen Stoffmodells EXPO-COM. Die Entwicklung erfolgte auf der Basis von TK-031 (Triaxialer Langzeitversuch von BGR; Versuchsdauer ca. 300 d), drei Ödometer-Langzeitversuchen von GRS mit einer Versuchsdauer von jeweils ca. 1600 d und variiertes Feuchtigkeit (dry/0,1 %/wet) und TUC-V2 (triaxialer Langzeitversuch von TUC, Versuchsdauer ca. 750 d). Das neu entwickelte Stoffmodell beinhaltet funktionale Zusammenhänge für nahezu alle bisher bekannten Einflussfaktoren wie mechanische Beanspruchung in Form von isotropen und deviatorischen Beanspruchungsanteilen, thermische Beanspruchung in Form von Temperatur, Zustand und Zusammensetzung des Materials in Form von Porosität und vom Feuchtegehalt. Nicht berücksichtigt ist bisher der Einfluss der Korngrößenverteilung. Noch unzureichend belegt sind die Einflussfaktoren Feuchtegehalt und deviatorische Beanspruchung sowie die Bereiche der sehr hohen (über 20 %) und sehr niedrigen Porositäten (unter 5 %). Entsprechend werden diese Einflussfaktoren und Bereiche bei den laborativen Untersuchungen in AP1 priorisiert. Zur Demonstration der Leistungsfähigkeit und zur Validierung des neuen Stoffmodells erfolgte eine rechnerische Backanalyse für alle v. g. Laborversuche in deren Ergebnis eine gute Übereinstimmung zwischen Messwerten und Berechnungswerten gezeigt werden konnte.

4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1: Fortsetzung von systematischen Untersuchungsreihen mit Variation der Steuerungsparameter in der Vorkompaktion zur Herstellung von Prüfkörpern für weitere mikrostrukturelle Untersuchungen und Langzeitkompaktionsversuche.
- AP2: Untersuchung des Permeabilitätsverhaltens der langzeitkompaktierten Proben TK-033 und TK-031 von BGR sowie des Prüfkörpers TUC-V2. Endauswertung des Langzeitkompaktionsversuchs TUC-V2 und Übergabe der Messdaten an Projektpartner zur Verwendung für Benchmark-Analysen. Durchführung eines weiteren Langzeitkompaktionsversuchs TUC-V4 mit variierten deviatorischen Belastungsniveaus.
- AP3: Nachrechnung der Phasen 1 bis 5 des Versuchs TUC-V2 zur Validierung und zur Demonstration der Leistungsfähigkeit des neuen Stoffmodells. Implementierung des neuen Stoffmodells in eine für FLAC3D 7.0 geeignete cpp-Datei. Die bisherige, im Rahmen von KOMPASS II erfolgte Implementierung wurde durch eine Programmierung auf "FISH-Ebene" realisiert. Erste Simulationen für eine verfüllte Strecke mit den aus dem Versuch TK-031 ermittelten Materialparametern.

5. Berichte, Veröffentlichungen

SAFEND-BASE. U. Dusterloh, U., Lerche, S.: Methodology of structured development and validation of multiphysical constitutive models using the example of crushed salt compaction under 3D THM load conditions, <https://sand.copernicus.org/articles/1/113/2021/>, Interdisziplinäres Forschungssymposium für die Sicherheit der nuklearen Entsorgung, Berlin, 10.-12.11.2021

Zuwendungsempfänger: Technische Universität Bergakademie Freiberg, Akademiestr. 6, 09599 Freiberg		Förderkennzeichen: 02 E 11961
Vorhabensbezeichnung: Entwicklung eines Salzgrusbasierten Versatzkonzepts unter der Option Rückholbarkeit - Phase 1 (SAVER)		
Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte, Feld: 2.2		
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2021 bis 30.06.2023	Berichtszeitraum: 01.07.2021 bis 31.12.2021	
Gesamtkosten des Vorhabens: 554.503,00 EUR	Projektleiter: 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 durch den Salzbinder Polyhalit wird eine ausreichend hohe Stützwirkung des Versatzes erreicht, so dass 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 GESAV-Rezeptur wurde unter der Nr. DE 10 2015 005 288 patentiert.

Im GESAV II-Vorhaben wurde als optimale Einbautechnologie für die patentierte Rezeptur die Einbringung mit Lader und anschließender Verdichtung mit Rüttelplatte und Zuschleudern des Firstspaltes entwickelt. Im SAVER-Projekt (aktuell Phase 1) soll nun die Anwendbarkeit des Verfahrens sowohl auf GESAV- als auch auf KOMPASS (Salzgrus)-Material weiter untersucht und die Parameter durch entsprechende Messeinrichtungen aufgenommen werden. Durch technische Optimierung der Rüttelplatte soll der Firstspalt so weit minimiert werden, dass ein Zuschleudern nicht mehr nötig ist. Die Effizienz des Verfahrens würde damit weiter steigen.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP1: Versuchskonzeption

AP1.1: Messkonzept für ein Langzeitmonitoring

AP1.2: Vorbereitung der großtechnischen Realisierung in der Grube Sondershausen

AP1.3: Entwicklung einer geeigneten Behälterattrappe

AP2: Geochemie

AP2.1: Qualitätssicherungssystem für die Ausgangsmaterialien

AP2.2: Verbesserung der Rezeptur des GESAV-Materials hinsichtlich einer möglichen geringeren Restfeuchte

AP3: Untertageversuche

AP3.1: Versatzkörper aus angefeuchteten Salzgrus (Referenzmaterial zu Vorhaben KOMPASS)

AP3.2: Versatzkörper aus verbessertem GESAV-Material

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP1: Das Messkonzept im SAVER Projekt wurde an GESAV II orientiert und zum größten Teil übernommen bzw. weiterentwickelt (AP1.1). Der Einbau des Messequipments in der Grube Sondershausen ist bis auf Restarbeiten abgeschlossen (AP1.2). Es finden derzeit Absprachen mit BGE-Technology GmbH zur Konzeption einer geeigneten, geometrischen POLLUX-Behälterattrappe statt. Diese soll aus leichter händelbarem Material sein. Die originalen POLLUX-Behälter wären zu kostenintensiv und zu schwer mit ca. 65 t Gesamtgewicht (AP1.3).
- AP2: Für die am Versuchsort in offenen Big-Bags lagernden Ausgangskomponenten zur Herstellung des Salzbinders (Restmaterial aus dem GESAVII-Projekt) wurde röntgenographisch der Phasenbestand überprüft. Veränderungen, wie z. B. durch Hydratation oder Verunreinigung aufgrund der offenen Lagerung, konnten ausgeschlossen werden. Die zur Salzbindeherstellung notwendige und noch vorhandene DEUSA-Lösung wurde analytisch bzgl. ihrer $MgCl_2$ -Konzentration überprüft (AP2.1). Zum Zeitpunkt der Antragstellung für SAVER (Juni/Juli 2020) deutete sich der Bedarf zur Optimierung der Salzbindeherzeugung an, da in den röntgenographischen Messungen zur Verfolgung der Entwicklung des Salzbindephasenbestandes von den drei Ausgangssalzen lediglich das Calciumsulfat-Halbhydrat immer noch neben kristallisiertem Polyhalit vorlag. Im Zuge der GESAVII-Verlängerung (09/2020 – 04/2021) hat sich allerdings mit dem weiteren Monitoring an den Versatzkörpern gezeigt, dass sich das $CaSO_4$ -Halbhydrat noch vollständig unter weiterer Polyhalitbildung umsetzt. Eine dahingehende Anpassung bzw. Verbesserung der GESAV-Rezeptur ist damit nicht notwendig (AP2.2).

4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1: Für das vergleichende Monitoring von GESAV und KOMPASS-Salzgrus bedarf es einer Neukalibrierung der Feuchtesensoren, da diese speziell nur für das GESAV-Material kalibriert wurden. Daran im Anschluss kann die Vibrationsplatte technisch modifiziert werden und der Einbau der Versatzkörper beginnen (AP1.2). In Zusammenarbeit mit der BGE Technology GmbH soll das Attrappenkonzept für POLLUX-Behälter finalisiert werden. Anschließend werden zwei Attrappen gebaut und in die Versatzkörper eingebaut. Zusätzlich sollen Miniaturmodelle mit in den Versatzkörper eingebracht werden, um die Wechselwirkung zwischen Salzgrus und POLLUX-Behälter-Werkstoff zu untersuchen. Die Miniaturmodelle sollen nach Projektende aus dem Versatzkörper geborgen werden (Rückholung). Die POLLUX-Attrappen werden aus einem leichteren Material, wie bspw. PVC gebaut (AP1.3).
- AP2: Es werden Rückstellproben vor Erstellung der Versatzkörper hergestellt. Eingangsuntersuchungen aller verwendeten Materialien werden durchgeführt. Die Versatzkörper werden nach Herstellung kontinuierlich in regelmäßigen Abständen beprobt und geochemisch analysiert (AP2.1). Zu einer Rezepturanpassung vor dem Hintergrund der Verringerung der Restfeuchte finden Absprachen im nächsten Projektgespräch statt (AP2.2).
- AP3: Die Versatzkörperherstellung aus KOMPASS-Salzgrus und GESAV wird begonnen sobald die technische Optimierung zur Einbringung, die Materialbestellung und der Attrappenbau erfolgt sind (AP3.1, AP3.2).

5. Berichte, Veröffentlichungen

Vorstellung SAVER-Projekte auf KOMPASS-II-Kick-Off und bei US/German Workshop

Zuwendungsempfänger: Technische Universität Bergakademie Freiberg, Akademiestr. 6, 09599 Freiberg		Förderkennzeichen: 02 E 11971A
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Anwendbarkeit von Niedertemperatur-Salzschmelzen für Verschlussmaßnahmen von Endlagern für radioaktiver Abfälle im Wirtsgestein Salz (SalVE), Teilprojekt A		
Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte, Feld: 2.2+2.3		
Laufzeit des Vorhabens: 01.08.2021 bis 31.01.2024	Berichtszeitraum: 01.08.2021 bis 31.12.2021	
Gesamtkosten des Vorhabens: 457.118,00 EUR	Projektleiter: Dr. Freyer	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Hauptziel des Vorhabens besteht darin, die Möglichkeit einer Anwendung von Salzschmelzensystemen (SSS) für Verschlusskomponenten in einem Endlager in Steinsalz zu prüfen und ggf. konkrete Konzepte dafür herzuleiten. Der Einsatz ist in Bezug auf die Betriebsphase, eine eventuelle Rückholung, und den langzeitlichen, sicheren Einschluss zu prüfen, aber auch übergreifend zu betrachten. Als Teilziele folgen daraus: Anforderungen an die SSS sind zu formulieren und bekannte Vertreter hinsichtlich ihrer Eignung zu bewerten. Mit Hilfe von Versuchen Liter-Maßstab sind Verarbeitungs-, Erstarrungs- und Reaktionsverhalten zu untersuchen sowie ein Einbringkonzept für den untertägigen Einsatz zu entwickeln. Abschließend sind Planungshinweise für eventuelle weitergehende Demonstrationsversuche zu formulieren.

Bei dem Vorhaben handelt es sich um Verbundprojekt zwischen TUBAF (mit dem IfG Leipzig als Unterauftragnehmer) und BGE TECHNOLOGY GmbH (FK 02E11971B)

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Erarbeiten der Anforderungen und Randbedingungen
- AP2: Datenzusammenstellung, Literatursichtung relevanter Salzschmelzensysteme
- AP3: Präzisierung der geologisch/technologischen und thermischen Randbedingungen für die vorausgewählten Endlagerkonzepte im Steinsalz
- AP4: Auswahl in Frage kommender Salzschmelzen für die identifizierten Randbedingungen
- AP5: Überprüfung der Einsatzfähigkeit von Salzschmelzen unter den Bedingungen eines Endlagerbergwerkes
- AP6: Handhabungsversuche an positiv befundenen Salzschmelzen
- AP7: Ableitung von Empfehlungen zur Anwendbarkeit ausgewählter Salzschmelzen in einem HAW Endlagerbergwerk und zur Durchführung weiterer Forschungsarbeiten
- AP8: Dokumentation und Berichterstattung

Die Arbeitspakete 1, 3, 4, 5, 7 und 8 werden gemeinschaftlich bearbeitet, AP2 und AP6 ohne Beteiligung des Verbundpartners.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP1: Mit der Erarbeitung einer ersten Ideenskizze wurde zuerst die notwendige Anlagenleistung zum Schmelzen eines einfachen Salzschnmelzensystems abgeschätzt. Darauf aufbauend konnte die Anzahl der Transporte im Zusammenhang mit der Behältergröße und damit die Dauer verschiedener Verschlussvorhaben eingegrenzt werden (daneben wird auch der Transport über Leitungen diskutiert). Dabei wurde deutlich, dass große Hohlräume, wie im Bereich der Streckenverschlüsse denkbar, nur mit großem energetischen und zeitlichem Aufwand sowie hohem Materialbedarf verschließbar sind. Möglichkeiten zur Minimierung des Materialbedarfs wurden eröffnet, z. B. die Einbringung in Kombination mit anderen Verschlussmaterialien, wie Salzgrus, GESAV u. a. Baustoffmaterialien. In Diskussion steht die Möglichkeit der Schmelzenherstellung über- oder untertage und damit die Transportart und der Transportweg. Für zukünftige betriebssicherheitsliche Überlegungen wurden in der Ideenskizze ebenfalls sicherheitstechnische Aspekte der zunächst gewählten SSS dargelegt.
- AP2: Es wurden SSS mit Schmelzpunkten bis 200 °C aus der Literatur systematisiert und mit der Datenzusammenstellung hinsichtlich ihrer Schmelzdiagramme, Schmelzpunkte, Dichte, Schmelzenthalpie, spez. Wärmekapazität, Wärmeleitfähigkeit, Viskosität und chem. Reaktionsfähigkeit begonnen. Im Fokus stehen zunächst Mischungen von Alkalimetallchloriden/-bromiden mit Aluminium(III)-chlorid/-bromid sowie Mischungen von Alkalisulfiden mit Schwefel. Schmelzen von Nitraten und Nitriten wurden aufgrund ihrer für die Verwendung in Endlagern ungünstigen Eigenschaft der oxidierenden Wirkung ausgeschlossen.
- AP6: Es wurden erste Handhabungsversuche mit einer NaCl – AlCl₃ – Schmelze im Maßstab bis 2 L durchgeführt. Dabei wurden die geringe Viskosität und damit das Eindringen in kleine Öffnungen beobachtet. Zusätzlich wurde die Absenkung der Oberfläche (Volumenabnahme) eines Prüfkörpers beim Auskühlen deutlich, die beim großmaßstäblichen Einsatz zu beachten gilt.

4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1: Ableitung nachzuweisender Eigenschaften und Entwicklung eines Grobkonzepts zur geotechnischen Nachweisführung für den modellbasierten Beleg der Funktionsfähigkeit (IfG) in Abstimmung mit BGE TECHNOLOGY. Formulierung des Verbesserungspotentials durch Salzschnmelzen an den identifizierten Lokationen gegenüber anderen Materialien.
- AP2: Fortführung der Literaturrecherche und Fertigstellung der Datenzusammenstellung insb. Betrachtung von CuCl-haltigen Systemen.
- AP3: Szenarienableitung zur Temperaturentwicklung am Einsatzort und zu themomechanischen Einwirkungen auf Verfüllbereiche sowie an Kontaktbereichen Schmelze/Salz/Abschlusspfropfen (IfG).
- AP4: Bewertung der in AP2 zusammengestellten Salzschnmelzensysteme.
- AP5: Konkretisierung der Ideenskizze zur Einbringung von Salzschnmelzen in Schacht- und Streckenverschlüssen (IfG) in Zusammenarbeit mit der BGE TECHNOLOGY.
- AP6: Herstellung erster Salzschnmelzen-Prüfkörper für geomechanische Untersuchungen, Substanzen- und Gerätebeschaffung, Versuchsplanung.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Auftragnehmer: BGE Technology GmbH, Eschenstr. 55, 31224 Peine		Förderkennzeichen: 02 E 11971B	
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Anwendbarkeit von Niedertemperatur-Salzschmelzen für Verschlussmaßnahmen von Endlagern für radioaktiver Abfälle im Wirtsgestein Salz (SalVE), Teilprojekt B			
Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte, Feld: 2.2+2.3			
Laufzeit des Vorhabens: 01.08.2021 bis 31.01.2024		Berichtszeitraum: 01.08.2021 bis 31.12.2021	
Gesamtkosten des Vorhabens: 119.416,50 EUR		Projektleiter: Herold	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Hauptziel des Vorhabens besteht darin, die Möglichkeit einer Anwendung von Salzschmelzensystemen (SSS) für Verschlusskomponenten in einem Endlager in Steinsalz zu prüfen und ggf. konkrete Konzepte dafür herzuleiten. Der Einsatz ist in Bezug auf die Betriebsphase, eine eventuelle Rückholung, und den langzeitlichen, sicheren Einschluss zu prüfen, aber auch übergreifend zu betrachten. Als Teilziele folgen daraus: Anforderungen an die SSS sind zu formulieren und bekannte Vertreter hinsichtlich ihrer Eignung zu bewerten. Mit Hilfe von Versuchen im Liter-Maßstab sind Verarbeitungs-, Erstarrungs- und Reaktionsverhalten zu untersuchen sowie ein Einbringkonzept für den untertägigen Einsatz zu entwickeln. Abschließend sind Planungshinweise für eventuelle weitergehende Demonstrationsversuche zu formulieren.

Bei dem Vorhaben handelt es sich um ein Verbundprojekt zwischen BGE TECHNOLOGY und der TU Bergakademie Freiberg (mit dem Institut für Gebirgsmechanik in Leipzig als Unterauftragnehmer) (02E11971A)

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Erarbeiten der Anforderungen und Randbedingungen
- AP2: Datenzusammenstellung, Literatursichtung relevanter Salzschmelzensysteme
- AP3: Präzisierung der geologisch/technologischen und thermischen Randbedingungen für die vorausgewählten Endlagerkonzepte im Steinsalz
- AP4: Auswahl in Frage kommender Salzschmelzen für die identifizierten Randbedingungen
- AP5: Überprüfung der Einsatzfähigkeit von Salzschmelzen unter den Bedingungen eines Endlagerbergwerkes
- AP6: Handhabungsversuche an positiv befundenen Salzschmelzen
- AP7: Ableitung von Empfehlungen zur Anwendbarkeit ausgewählter Salzschmelzen in einem HAW Endlagerbergwerk und zur Durchführung weiterer Forschungsarbeiten
- AP8: Dokumentation und Berichterstattung

Die Arbeitspakete 1, 3, 4, 5, 7 und 8 werden gemeinschaftlich bearbeitet, AP2 und AP6 ohne Beteiligung des Verbundpartners.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Das Projekt wurde im Berichtszeitraum begonnen. Es fanden zwei Projektgespräche statt.

- AP1: Anhand je eines Endlagerkonzeptes für die flache und steile Lagerung von Steinsalz, wurden Bereiche für den Einsatz von Salzschnmelzen als Verschlusselemente in Strecken, Schächten und Erkundungsbohrlöchern identifiziert. Dabei handelt es sich bevorzugt um die bisher durch Salzgrus verfüllten Bereiche innerhalb von Verschlussbauwerken. Eine Verfüllung von Versatzbereichen, also die Hohlraumverfüllung von Strecken, wird nicht berücksichtigt. Die Einsatzbereiche gehen mit sehr unterschiedlichen Bedingungen wie Transportentfernung, Einbaulage, Volumen und Dimensionen einher und bilden damit auch eine Grundlage für abweichende Konfigurationen. Aufgrund der großen Entfernung zu den Einlagerungsbereichen werden innerhalb des Vorhabens Schmelzen mit einer maximalen Temperatur von 200 °C als anwendbar definiert. Darauf aufbauend wurden die unterschiedlichen Anforderungen und grundlegenden Randbedingungen zwischen den Projektpartnern erörtert. Erste Ansätze zur Einbringung mittels Förderleitung bzw. ihrer Vor- und Nachteile wurden aufbauend auf einer Ideenskizze diskutiert.
- AP5: Mit Hilfe einer ersten Ideenskizze wurde zuerst die notwendige Anlagenleistung zum Schmelzen eines einfachen Salzschnmelzensystems abgeschätzt. Darauf aufbauend konnte die Anzahl der Transporte und damit die Dauer verschiedener Verschlussvorhaben eingegrenzt werden. Dabei wurde deutlich, dass große Hohlräume, wie sie beispielsweise im Bereich der Streckenverschlüsse existieren, nur mit großem energetischen und zeitlichen Aufwand umsetzbar sind. Hiermit wurde die Notwendigkeit weiterer Optimierungen zum eingesetzten Schmelzenvolumen in den Verschlüssen deutlich. Die zugehörigen Transporte geben darüber hinaus auch Gründe für eine genauere Abwägung der Transportmittel und der Örtlichkeit für den Schmelzofen. Diese werden auch auf Grundlage der sicherheits-technischen Aspekte der Ideenskizze hinterfragt.

4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1: Herausarbeitung der Erhöhung des Sicherheitsniveaus beim Einsatz von Salzschnmelzen. Beginn der Klärung einer bergbaulichen Zulassung für ein realistisches Salzschnmelzensystem. Präzisierung des Anwendungsspektrums im Salz. Ableitung vorläufiger Anforderungen an die Materialien und nachzuweisenden Eigenschaften.
- AP3: Kurzbeschreibung der ausgewählten technischen Endlagerkonzepte sowie der Auslegung der Endlager.
- AP5: Variantenstudie zur Positionierung des Schmelzofens (über Tage/unter Tage) und zum Transport der Schmelze bzw. ihrer Komponenten in Zusammenarbeit mit der TU Bergakademie Freiberg. Recherche am Markt vorhandener Lösungen und bereits umgesetzter Lösungen für konkrete Fälle.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 11981A
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Implementierung eines Monitoringsystems zur Evaluierung der Korrosionsvorgänge an Behältermaterialien in Bentonit-basierten Endlagerkonzepten (IMKORB), Teilprojekt A		
Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte, Feld: 2.4		
Laufzeit des Vorhabens: 01.08.2021 bis 31.07.2022	Berichtszeitraum: 01.08.2021 bis 31.12.2021	
Gesamtkosten des Vorhabens: 127.129,00 EUR	Projektleiter: Munöz	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Im Vorhaben wird eine grundlegende Beschreibung der möglichen Korrosionsvorgänge in der technischen Barriere erfolgen, die in den Wirtgesteinen Ton und Granit aufgrund der Wechselwirkung des Behältermaterials mit dem Verfüll-Stoff Bentonit auftreten.

Dazu wird eine umfassende Korrosionsstudie erstellt, die sowohl Feldexperimente in einem Bohrloch im Grimsel-Felslabor als auch innovative Laboruntersuchungen beinhaltet.

Ein möglichst umfassendes Verständnis der metallischen Korrosion von diversen degradationsbeständigen und für den Endlagerbehälter infrage kommenden Materialien soll entwickelt werden. Dabei werden möglichst realitätsnahe Temperatur-, Druck- und chemische Bedingungen berücksichtigt, wie sie im Nahfeld eines Endlagers für wärmeentwickelnde radioaktive Abfälle im Tongestein zu erwarten sind. Zu den Feldkorrosionsstudien gehört insbesondere die Entwicklung eines Monitoringsystems, mit dem Korrosionsvorgänge direkt verfolgt werden können.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Im Einzelnen werden folgende Teilziele verfolgt:

- AP1: Entwicklung der elektrochemischen Sensorik zur Anwendung in In-Situ-Experimenten.
- AP1.1: Elektrochemische Untersuchungen der Korrosion an der Metall-Porenwasser Grenzfläche.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Die Korrosionskinetik von Kugelgraphitstahl GGG40 wurde in Porenwasser mittels Polarisationskurven und elektrochemischer Impedanz in Opalinuston-Wasser bei pH-Werten von 7.6 (neutral), 9 und 11 und unter Drücken von 5 und 100 bar bei 30 °C untersucht.

Die Ergebnisse der vorläufigen Experimente zeigen, dass die aktive anodische Auflösung des Stahls bei der neutralen Opalinuston-Lösung wandelt in ein passives Verhalten bei pH-Werten > 10 um, mit dem Auftreten eines schlagartigen Stromanstiegs bei dem anodischen Potentialscan, die auf Lochfraßkorrosion hinweist. Ein Druck von 100 bar erwies einen schwachen, dennoch bemerkbaren Einfluss auf die Auflösungskinetik in neutralen Lösungen.

Ein Elektrochemie-Messplatz, der zwei Bentonit-Zellen beinhaltet wurde aufgebaut. Mit dieser Zelle lassen sich die Korrosionsprozesse der Behältermaterialien in direktem Kontakt zu übersättigten Bentonit in mittelzeitigen Experimenten untersuchen. Dazu sind miniaturisierte Platin-Sensoren eingebaut, wodurch die Änderungen der Chemie nah an der Grenzfläche mittels Voltammetrie verfolgt werden kann.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Vervollständigung der systematischen Korrosionsuntersuchungen von GGG40 Stahl im Porenwasser vor und nach der Sättigung mit Wyoming-Bentonit.
- Systematische Korrosionsstudien von CuNi30Mn1Fe/2.0882 in Porenwasser.
- Auswertung der Oberflächenanalyse ausgewählter Proben (SEM-EDX und XPS-Spektren).
- Durchführung der mittelzeitigen Korrosionsexperimente mit dem Bentonit-Zellen-Messplatz.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Hermann-von-Helmholtz-Platz 1, 76344 Eggenstein-Leopoldshafen		Förderkennzeichen: 02 E 11981B
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Implementierung eines Monitoringsystems zur Evaluierung der Korrosionsvorgänge an Behältermaterialien in Bentonit-basierten Endlagerkonzepten (IMKORB), Teilprojekt B		
Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte, Feld: 2.4		
Laufzeit des Vorhabens: 01.08.2021 bis 31.07.2022	Berichtszeitraum: 01.08.2021 bis 31.12.2021	
Gesamtkosten des Vorhabens: 86.423,00 EUR	Projektleiter: Dr. Finck	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Die chemische und mechanische Stabilität von Metallbehältern für radioaktive Abfälle stellt einen wichtigen Aspekt im Rahmen der Langzeitsicherheitsanalyse dar. Für eine realitätsnahe Modellierung der Behälterkorrosion unter endlagerrelevanten Bedingungen ist ein detailliertes Verständnis der zugrundeliegenden Teilprozesse erforderlich. Ziel dieses Vorhabens ist, das Verständnis der Korrosion des metallischen Abfallbehälters in Bentonit-basiertem Milieu unter den T- und P-Bedingungen im Nahfeld eines Endlagers für wärmeentwickelnde Abfälle wesentlich zu verbessern. Dies wird durch die Kombination von In-situ-Experimenten im Untertagelabor und Experimenten im Labor mit Metallcoupons unter definierten Bedingungen erreicht. Mit Hilfe elektrochemischer Methoden sollen Teilreaktionen der Metallkorrosion erschlossen werden und mit Hilfe spektroskopischer und mikroskopischer Methoden die Struktur und Zusammensetzung der Korrosionsprodukte sowie deren Oberflächenmorphologie charakterisiert werden. Eine Zusammenarbeit innerhalb von IMKORB erfolgt mit der GRS Braunschweig, der BGR und der Leibniz Universität Hannover.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

KIT-INE arbeitet innerhalb von IMKORB in den folgenden Arbeitspaketen:

AP3: Laboruntersuchungen der Korrosion von Stahlcoupons in Bentonit

AP4: In-situ-Korrosionsexperimente von Stahlcoupons in Bentonit im Untertagelabor in Grimsel

AP6: Dokumentation und Publikation

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

KIT-INE arbeitet innerhalb von IMKORB in den folgenden drei Arbeitspaketen.

- AP3: Die experimentellen Arbeiten von KIT-INE in IMKORB werden im Wesentlichen von einem Doktoranden durchgeführt. Die Doktorandenstelle wurde ausgeschrieben und Herr Singh als Doktorand ausgewählt.
Zudem wurde mit dem Aufbau der Korrosionsexperimente unter dynamischen Bedingungen begonnen. Die Reaktoren wurden konzipiert und gebaut sowie weiteres benötigtes Material für die Arbeiten bestellt.
- AP4: Metallische Coupons, welche in Korrosionsexperimenten im Untertagelabor in Grimsel (CH) eingesetzt werden, wurden bereits vor Projektbeginn von IMKORB bereitgestellt (geschnitten und poliert). Im vierten Quartal von 2021 wurden Coupons unter Ausschluss von Luft in Kontakt mit Bentonit in Behälter gebracht und die befüllten Behälter mit Porenwasser gesättigt. Die befüllten Behälter wurden luftdicht verpackt und an das Untertagelabor transportiert, wo die Behälter unter Luftausschluss in ein Bohrloch eingelagert wurden.
- AP6: Keine Arbeiten innerhalb des Berichtszeitraums.

4. Geplante Weiterarbeiten

- AP3: Der Aufbau der Experimente unter dynamischen Bedingungen wird abgeschlossen und eine Dichtigkeitsprüfung durchgeführt. Korrosionsexperimente unter statischen Bedingungen mit polierten Metallcoupons sollen in einer Handschuhbox unter Schutzgasatmosphäre gestartet werden. Die Ausgangsmaterialien (Bentonit, Coupons) sollen vor Benutzung in den Experimenten mit verschiedenen Methoden eingehend charakterisiert werden.
- AP4: Fortsetzung der wissenschaftlich/technischen Koordinierung hinsichtlich der Beteiligung von KIT-INE am MaCoTe Experiment im Untertagelabor Grimsel (CH).
- AP6: Es sind im nächsten Halbjahr keine Arbeiten hierzu geplant.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Leibniz Universität Hannover		Förderkennzeichen: 02 E 11981C
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Implementierung eines Monitoringsystems zur Evaluierung der Korrosionsvorgänge an Behältermaterialien in Bentonit-basierten Endlagerkonzepten (IMKORB), Teilprojekt C		
Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte, Feld: 2.4		
Laufzeit des Vorhabens: 01.08.2021 bis 31.07.2022	Berichtszeitraum: 01.08.2021 bis 31.12.2021	
Gesamtkosten des Vorhabens: 108.358,00 EUR	Projektleiter: Dr. Hassel	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Hauptziel des Verbundvorhabens IMKORB mit der Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Fachbereich Endlagersicherheitsforschung, am Standort Braunschweig, der Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR) und dem Institut für Nukleare Entsorgung am Karlsruher Institut für Technologie (KIT-INE) ist das Design und die Implementierung eines Monitoringsystems zur Bewertung der Korrosionsverläufe von potentiellen Werkstoffen für Endlagerbehälter in Langzeit-In-situ-Experimenten durch Fernbestimmung von lokalen physikalisch-chemischen Parametern. Die Arbeiten werden strategisch in die Entwicklung einer sogenannten „Korrosionskarte“ und in die Entwicklung und Erprobung einer Messsonde unterteilt.

Mittels der Korrosionskarte sollen Zusammenhänge zwischen der Art der Korrosion und den mittels Sensoren messbaren Indikatoren dargestellt werden. Hierzu ist ein möglichst umfassendes Verständnis der Korrosion von Metallen unter endlagernahen Randbedingungen in Ton- oder Kristallingestein erforderlich.

Neben dem Design der eigentlichen Messsonde gehört auch die Entwicklung von ausreichend miniaturisierter Sensorik zu den Aufgaben des Vorhabens. Die Sensoren dienen hierbei der Erfassung der verschiedenen korrosionsempfindlichen Parameter. Es werden hierfür Impedanz- und Polarisationsmethoden angewendet, wodurch neben der Ermittlung der Korrosionsgeschwindigkeit auch Diffusionsprozesse und Passivierungen erfasst werden können.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Entwicklung der elektrochemischen Sensorik zur Anwendung in In-Situ-Experimenten
- AP2: Laboruntersuchungen zum Einfluss des Materialzustandes (Herstellungsprozess und Zusammensetzung) auf den Korrosionsangriff der Metallcoupons
- AP3: Laboruntersuchungen der Korrosion von Stahlcoupons in Bentonit
- AP4: In-Situ-Korrosionsuntersuchungen von Stahl in Bentonit am Untertagelabor in Grimsel
- AP5: Design und Konstruktion einer optimierten In-Situ-Methodik zum Monitoring und zu Langzeitkorrosionsexperimenten
- AP6: Koordination und Dokumentation

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im Rahmen des AP2 wurde bei dem Unterpunkt AP2.1 auf Grundlage verschiedener Behälterkonzeptstudien und dem internationalen Stand der Technik eine Materialauswahl zur Charakterisierung und Durchführung der Korrosionsstudien erstellt. Hierbei wurden unter anderem die bestehenden Lagerbehälterkonzepte verschiedener internationaler Firmen berücksichtigt. Bei den bestehenden Konzepten sind die äußeren Behälterschichten von besonderem Interesse, da diese in direktem Kontakt mit dem Verfüllmaterial aus Bentonit stehen werden. Aufgrund der geringen Korrosionsneigung soll in mehreren Konzepten unlegierter oder niedriglegierter Stahl zum Einsatz kommen (1.0345 oder 1.6210). Dieser hat den Vorteil, dass ein stoffschlüssiger Verschluss des Behälters mittels Schweißen möglich ist und somit ein dauerhaft gasdichter Verschluss erzielt werden kann. Es ergeben sich jedoch Beschränkungen in der schweißbaren Materialstärke, die aber nicht im Widerspruch mit den radiologischen Anforderungen stehen. Da der Stahlwerkstoff nicht gegossen werden kann, muss der Behälter durch Umformen und Spanen hergestellt werden, was texturierte Gefüge nach sich ziehen kann und bei den weiteren Untersuchungen bedacht werden muss. Bei den bereits weit fortgeschrittenen Planungen in Schweden soll ein verhältnismäßig dünner, sauerstoff- und schwefelfreier (OFC) Kupfermantel als Korrosionsbarriere dienen. Der Kupferbehälter soll vollständig verschweißt werden, wodurch auch hier ein gasdichter stoffschlüssiger Verschluss erreicht wird. Die Abschirmung der Umwelt vor der Strahlung erfolgt durch einen inneren Behälter, der auch das Inventar trägt. In weiteren Behälterkonzepten soll aufgrund der einfacheren Herstellbarkeit der äußere Behälter aus Gusseisen hergestellt werden (GJS 400-15). Bei dickwandigen Gussbauteilen können aufgrund der uneinheitlichen Wärmeabfuhr beim Abkühlen über den Materialquerschnitt ungleichmäßige Gefüge oder Körnungen entstehen. Diese Korngrößenverteilungen müssen im Rahmen der weiteren Untersuchungen berücksichtigt werden, da sie einen Einfluss auf die korrosiven Eigenschaften haben. Der Guss bringt zudem eine geringe Schweißneigung mit sich, wodurch eine Verschraubung zum Verschluss des Behälters nötig wird. Die Dichtheit des Behälters wird in diesem Fall über eine zusätzliche Dichtung gewährleistet, die jedoch keine vergleichbaren Zeiträume wie ein stoffschlüssiger Verbund für die Dichtfunktion gewährleisten kann. Neben der Betrachtung der in bestehenden Konzepten vorgesehenen Außenmaterialien soll auch der für den Einsatz bei Tragstrukturen vorgesehene nichtrostende Edelstahl (1.4833) betrachtet werden.

Als weiteres Material, das in einem ähnlichen Szenario wie der Kupfermantel im schwedischen Konzept verwendet werden kann, kommt Zirkonium (Zr702) in Frage und sollte aufgrund seiner Korrosionsbeständigkeit in den weiteren Untersuchungen betrachtet werden.

Die hier beschriebenen Materialien stehen bereits zur Verfügung und werden für die Materialcharakterisierung vorbereitet.

4. Geplante Weiterarbeiten

Im zweiten Halbjahr der Laufzeit werden die Materialien mittels verschiedener metallographischer Methoden charakterisiert.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Technische Universität Clausthal, Adolph-Römer-Str. 2a, 38678 Clausthal-Zellerfeld		Förderkennzeichen: 02 E 11991
Vorhabensbezeichnung: Entwicklung und Validation einer neuartigen Versuchstechnik für triaxiale Kriechversuche bei geringer deviatorischer Belastung (KRIECHTECH)		
Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit Bereich C1: Standortauswahl, Feld: 1.2		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2021 bis 30.09.2024	Berichtszeitraum: 01.10.2021 bis 31.12.2021	
Gesamtkosten des Vorhabens: 304.468,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Düsterloh	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Entwicklung und Validation einer neuartigen Versuchstechnik für triaxiale Kriechversuche bei geringer deviatorischer Belastung durch Konstruktion, Bau und Inbetriebnahme von drei Triaxialprüfständen mit hochpräziser Axial- und Radiallastregelung für verzerrungsgeregelte Kriechversuche, Durchführung und Auswertung verzerrungsgeregelter Triaxialkriechversuche zur Quantifizierung des Kriechverhaltens von Salzgesteinen bei deviatorischen Beanspruchungen von $\sigma_v \approx 1 \text{ MPa} - 6 \text{ MPa}$ und numerische Sensitivitätsanalysen zum Einfluss des Kriechverhaltens bei kleinen deviatorischen Spannungen auf das langfristige Trag- und Deformationsverhalten des Gebirges im Umfeld untertägiger Endlager.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Konstruktion und Bau von Triaxialprüfständen mit hochpräziser Axial- und Radiallastregelung.
- AP2: Kalibrierung und Inbetriebnahme der Prüfstände und der zugehörigen Mess- und Regelungssoftware.
- AP3: Vergleichende Durchführung und Auswertung von Triaxialversuchen mit klassischer spannungsgeregelter Versuchstechnik und neuartiger verzerrungsgeregelter Versuchstechnik im Spannungsbereich von $\sigma_v = 1 \text{ MPa} - 6 \text{ MPa}$.
- AP4: Numerische Sensitivitätsanalysen zum Einfluss des Kriechverhaltens bei kleinen deviatorischen Spannungen auf das langfristige Trag- und Deformationsverhalten des Gebirges im Umfeld untertägiger Endlager.
- AP5: Erstellung Schlussbericht.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1: Vorbereitung Laborraum, Bestellung Material und Prüfanlagenkomponenten, mechanisch-hydraulischer Aufbau eines ersten von drei Triaxialprüfständen

AP2: -

AP3: -

AP4: -

4. Geplante Weiterarbeiten

AP1: Fertigstellung Triaxialprüfstände und Herrichtung Laborversuchsraum inkl. Isolierung und Temperierung

AP2: Herstellung Steinsalzprüfkörper für Kalibrierungsversuche

AP3: -

AP4: -

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Kaiserstr. 12, 76131 Karlsruhe		Förderkennzeichen: 02 E 12001A
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Sandwich Support Projekt 1: Heterogene Bentonithydratation (SAND- WICH-SP1), Teilprojekt A		
Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte, Feld: 2.3		
Laufzeit des Vorhabens: 01.12.2021 bis 30.11.2024	Berichtszeitraum: 01.12.2021 bis 31.12.2021	
Gesamtkosten des Vorhabens: 323.058,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Emmerich	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Ziel des Vorhabens ist die Vorhersage des makroskopischen Quelldrucks und die hydro-mechanisch-chemische Modellierung von Bentonitdichteelementen aus nationalen Ca-Bentoniten in Kontakt mit Na-reichen Porenwässern potentieller Wirtsgesteine basierend auf den initialen und sich ändernden Randbedingungen, Hydratationsbedingungen und physiko-chemischen Bentoniteigenschaften. Damit erfolgt der Skalenübergang von der molekularen auf die makroskopische Ebene. Das Vorhaben trägt dazu bei, die Frage zu beantworten, ob die Bentonitbarriere einen Gleichgewichtszustand bei $t = \infty$ erreicht, wodurch die Ermittlung des Gesamtverhaltens des Systems im SANDWICH-Hauptprojekt verbessert wird. Das Projekt ist ein Verbundprojekt zwischen KIT und RUB. Die Projektleitung liegt bei KIT.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Austauschprozesse, Quelldruckheterogenität und Porositätsentwicklung in Smectiten und Bentoniten aus mineralogischer Sicht (KIT)
- AP2: Quelldruckheterogenität von Bentonit aus geotechnischer Sicht (RUB). Es werden Elementversuche zum Quelldruckverlauf bei verschiedenen Randbedingungen sowie zu relevanten Pfaden der Saugspannungs-Wassergehaltsbeziehung durchgeführt
- AP3: Modell zur Quelldruckvorhersage (RUB, KIT). Beschreibung des Quellmechanismus anhand eines skalenübergreifenden Modells
- AP4: Koordination/Berichtswesen (KIT)

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP1: Die Zusammenstellung bekannter Materialparameter der zu untersuchenden Bentonite aus Literatur und Ergebnissen des Sandwich-HP wurde begonnen
- AP2: siehe Bericht RUB zu Teilprojekt B (02 E 12001B)
- AP3: Es wurden noch keine Arbeiten zu AP3 durchgeführt
- AP4: Das Kick-Off Meeting wurde als integrativer Bestandteil eines Projektmeetings des Sandwich-HP durchgeführt

4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1: Finalisierung Design Quelldruckzellen für Einsatz im μ Computertomographen, Aufbereitung der Ca-Bentonite Calcigel und Secursol UHP sowie Herstellung homoionischer Teilproben

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Ruhr-Universität Bochum, Universitätsstr. 150, 44801 Bochum		Förderkennzeichen: 02 E 12001B
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Sandwich Support Projekt 1: Heterogene Bentonithydratation (SANDWICH-SP1), Teilprojekt B		
Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte, Feld: 2.3		
Laufzeit des Vorhabens: 01.12.2021 bis 30.11.2024	Berichtszeitraum: 01.12.2021 bis 31.12.2021	
Gesamtkosten des Vorhabens: 268.932,00 EUR	Projektleiter: Dr. Baille	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Ziel des Vorhabens ist die Vorhersage des makroskopischen Quelldrucks und die hydro-mechanisch-chemische Modellierung von Bentonitdichtelelementen aus nationalen Ca-Bentoniten in Kontakt mit Na-reichen Porenwässern potentieller Wirtsgesteine basierend auf den initialen und sich ändernden Randbedingungen, Hydratationsbedingungen und physiko-chemischen Bentoniteigenschaften. Damit erfolgt der Skalenübergang von der molekularen auf die makroskopische Ebene. Das Vorhaben trägt dazu bei, die Frage zu beantworten, ob die Bentonitbarriere einen Gleichgewichtszustand bei $t = \infty$ erreicht, wodurch die Ermittlung des Gesamtverhaltens des Systems im SANDWICH-Hauptprojekt verbessert wird. Das Projekt ist ein Verbundprojekt zwischen KIT und RUB. Die Projektleitung liegt bei KIT.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Austauschprozesse, Quelldruckheterogenität und Porositätsentwicklung in Smectiten und Bentoniten aus mineralogischer Sicht (KIT)
- AP2: Quelldruckheterogenität von Bentonit aus geotechnischer Sicht (RUB). Es werden Elementversuche zum Quelldruckverlauf bei verschiedenen Randbedingungen sowie zu relevanten Pfaden der Saugspannungs-Wassergehaltsbeziehung durchgeführt
- AP3: Modell zur Quelldruckvorhersage (RUB, KIT). Beschreibung des Quellmechanismus anhand eines skalenübergreifenden Modells
- AP4: Koordination/Berichtswesen (KIT)

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1: Siehe Bericht KIT zu Teilprojekt A (02 E 12001A)

AP2: Die Zusammenstellung bekannter Hydratationsversuche und deren geotechnischer Initialzustände der zu untersuchenden Bentonite aus Literatur und Ergebnissen des Sandwich-HP wurde begonnen. Erste Elementversuche (Saugspannungs-Wassergehalts-Beziehung, SWCC) wurden begonnen

AP3: Es wurden noch keine Arbeiten zu AP3 durchgeführt

AP4: Das Kick-Off Meeting wurde als integrativer Bestandteil eines Projektmeetings des Sandwich-HP durchgeführt

4. Geplante Weiterarbeiten

AP1: Siehe Bericht KIT zu Teilprojekt A (02 E 12001A)

AP2: Fortsetzung der Elementversuche (SWCC, Quelldruckversuche an homogenen und heterogenen Proben) sowie Beginn des ersten Säulenversuches

AP3: Beginn der Arbeiten zur Modellierung

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

2.2 Vorhaben Bereich D1 – D3

Zuwendungsempfänger: Öko-Institut. Institut für angewandte Ökologie e. V., Merzhauser Str. 173, 79100 Freiburg		Förderkennzeichen: 02 E 11789
Vorhabensbezeichnung: Wegemanagement bei der Entsorgung hoch radioaktiver Abfälle in Deutschland (WERA)		
Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit Bereich D2: Sozio-technische Fragestellungen, Feld:2.1		
Laufzeit des Vorhabens: 01.06.2019 bis 31.08.2021	Berichtszeitraum: 01.07.2021 bis 31.08.2021	
Gesamtkosten des Vorhabens: 312.050,42 EUR	Projektleiter: Dr. Chaudry	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Projekt verfolgt das Ziel, Handlungsoptionen und Handlungsbedarfe in Bezug auf die Entsorgungswege für abgebrannte Brennelemente und hochradioaktive Abfälle aufzuzeigen. Es will damit eine Basis schaffen, die Integration der verschiedenen Entsorgungsschritte (Zwischenlagerung, Konditionierung, Transporte bis hin zur Endlagerung) aktiv zu gestalten. Außerdem sollen Aufgaben und Ziele für zukünftige Forschungs- und Entwicklungsmaßnahmen sichtbar gemacht und eine Grundlage für wirtschaftliche Betrachtungen im Zuge zukünftiger Konkretisierungen der Entsorgungswege geschaffen werden.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

WERA ist in vier Arbeitspakete gegliedert:

AP1 widmet sich der systematischen Zusammenstellung von relevanten Bausteinen der Entsorgung hoch radioaktiver Abfälle. Analog zu den bei der Langzeitsicherheitsanalyse eingeführten FEP-Katalogen entsteht auf diese Weise ein Baukasten, der zur Ableitung von Entsorgungsszenarien dient.

In AP2 werden aus den Bausteinen Entsorgungsszenarien von der Zwischenlagerung bis zur Endlagerung beschrieben. Dabei wird zunächst eine größere Anzahl an grundsätzlich plausiblen Szenarien entworfen.

In AP3 werden aus der so entstehenden größeren Anzahl an Szenarien drei repräsentative Szenarien für eine detailliertere Analyse ausgewählt. Für diese Szenarien werden die zu erwartenden Abläufe und Schnittstellen beschrieben und relevante Einflussgrößen identifiziert.

In AP4 werden die Erkenntnisse in einem Stakeholder-Workshop diskutiert, der mit einem Arbeitspapier vorbereitet wird. Die Ergebnisse fließen dann in den Abschlussbericht ein, in dem auch Vorschläge für zukünftige Forschungs- und Entwicklungsaufgaben adressiert werden.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1 und AP2:

Das Arbeitspaket 1 und Arbeitspaket 2 sind abgeschlossen. Im Berichtszeitraum wurden in den AP1 und 2 nur geringe Ergänzungen und Korrekturen vorgenommen, die sich aus der Bearbeitung von AP3 und 4 ergaben.

AP3:

In AP3 wurde die Plausibilitätsprüfung der in AP2 entwickelten Szenarien abgeschlossen und festgehalten. Die Szenarienanalyse wurde nach Auswertung der Diskussionen und Anregungen aus dem Stakeholderworkshop (siehe AP4) angepasst und abgeschlossen.

AP4:

Am 15. Juli 2021 wurde der in AP4 zentrale Stakeholderworkshop durchgeführt. 34 Wissenschaftler, Mitarbeiter von Behörden und Entsorgungsorganisationen nahmen daran teil. Die vorläufigen Ergebnisse der AP1-3 wurden in kurzen Vorträgen vorgestellt und anschließend mit den Teilnehmern diskutiert. Die Diskussion wurde protokolliert und Anregungen daraus zur Überarbeitung des Berichtsentwurfs und zur Ergänzung von AP3 übernommen. Der Abschlussbericht ist in Bearbeitung.

4. Geplante Weiterarbeiten

Im Berichtszeitraum 1/2022 sind folgende Arbeiten geplant:

- Fertigstellung des Abschlussberichts.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Technische Universität Clausthal, Adolph-Roemer-Str. 2a, 38678 Clausthal-Zellerfeld		Förderkennzeichen: 02 E 11849A
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt A		
Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit Bereich D2: Sozio-technische Fragestellungen, Feld:2.1		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2019 bis 30.09.2024	Berichtszeitraum: 01.07.2021 bis 31.12.2021	
Gesamtkosten des Vorhabens: 3.003.244,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Röhlig	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

In TRANSENS soll transdisziplinär geforscht werden: Die interessierte Öffentlichkeit und andere außerakademische Akteure werden planvoll in Forschungskontexte, konkret in Transdisziplinäre Arbeitspakete (TAP) eingebunden. Die Möglichkeiten transdisziplinärer Forschung in der nuklearen Entsorgung werden im Verbund systematisch reflektiert (Transdisziplinaritätsforschung). Spezielle Aktivitäten zielen auf Nachwuchsförderung und Kompetenzerhalt. Im TAP SAFE wird transdisziplinär untersucht, ob und inwieweit Sichtweisen von Nicht-Spezialisten nahelegen, das Konzept des Safety Case (SC) anzupassen oder weiterzuentwickeln, um so die Diskurs- und Beratungsfähigkeit zu verbessern. Das Institut für Endlagerforschung IELF koordiniert das TAP und bearbeitet mit weiteren Partnern die Module „Analyse“, „Synthese und Konzept“, „Transdisziplinäre Kommunikation und Auswertung“, „Ergebnisdarstellung von Modellrechnungen“ sowie „Berichterstattung und Empfehlungen“. Der Lehrstuhl für Deponietechnik und Geomechanik LfDG leistet Forschungsarbeiten in den Modulen „Transdisziplinäre Kommunikation und Auswertung“ und „Analyse des langzeitigen Systemverhaltens von Tiefenlagern“. Der Arbeitsschwerpunkt der risicare GmbH (im Unterauftrag) ist das Thema „Ungewissheiten“. In einem Verfahren, das die Rückholung eingelagerter Abfälle im Falle einer ungünstigen Entwicklung des Lagers vorsieht, muss man sich frühzeitig Gedanken machen über Monitoring-Strategien, Entscheidungswege, Entscheidungsträger und Verantwortlichkeiten. Dies ist Gegenstand des TAP TRUST, in dem der LfDG zu Fragen des Monitorings forscht. Das IELF koordiniert gemeinsam mit dem ITAS das Verbundvorhaben sowie die Außenkommunikation.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Nachfolgend werden die Arbeitsinhalte für das gesamte Verbundvorhaben dargestellt. Zur Zuordnung der Arbeiten zu den Vorhabenpartnern wird auf die Vorhabenbeschreibung verwiesen.

Modul SAFE 1: Analyse: Desk research; Literaturstudie zu Ungewissheiten; Zusammenstellung zu Szenarien; Zusammenstellung von Botschaften und Informationen sowie deren Darstellungen (Indikatoren, Abbildungen)

Modul SAFE 2: Synthese und Konzept: Synthese Modul 1: Gemeinsamkeiten, Schnittmengen; Konzepte und Wahrnehmung von Ungewissheiten; Methodisches Konzept für eine fokussierte empirische Untersuchung

Modul SAFE 3: Transdisziplinäre Kommunikation und Auswertung

Modul SAFE 4: Ergebnisdarstellung von Modellrechnungen, Indikatoren, Ungewissheiten

Modul SAFE 5: Analyse des langzeitigen Systemverhaltens von Tiefenlagern

Modul SAFE 7: Lösungsorientierte Berichterstattung und Empfehlungen

Modul TRUST 4: Analyse des Tiefen-/Endlagerverhaltens im Monitoringzeitraum anhand von numerischen TH²M-gekoppelten Simulationen: Literaturanalyse; Interaktiver Aufbau einer Gesprächsbasis mit der AGBe; Exemplarische Analyse des offenen/versetzten Tiefen-/Endlagerverhaltens im Monitoringzeitraum anhand von numerischen TH²M-gekoppelten Simulationen; Diskursiver Dialog mit der AGBe zur Identifizierung von Anforderungen an die Ausgestaltung von als vertrauenswürdig angesehenen Monitoringprogrammen; Rückspiegelung an außerwissenschaftliche Akteure/AGBe; Aufbau einer Plattform zur Visualisierung und Illustration von Simulationsergebnissen.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Die Arbeiten im Gesamtvorhaben sowie in den TAP wurden entsprechend der für Covid-19-Bedingungen entwickelten Szenarien fortgesetzt.

IELF (Koordination und Kommunikation): In Zusammenarbeit mit der LU Hannover wurde vom 19.-21.7. ein TRANSENS-Projekttreffen in Braunschweig organisiert und durchgeführt. Im Rahmen der ersten Präsenzveranstaltung seit Pandemiebeginn fand auch ein Teamleitungstreffen statt. Der „Bericht des Koordinators“ wurde turnusgemäß für das Gesamtprojekt erstellt. Das folgende Arbeitstreffen im Herbst wurde mit der TU Berlin als Hybridformat (vor Ort in Berlin und Zoom) vom

6.-8.10. organisiert und durchgeführt. Beim Forschungssymposium safeND des BASE wurden Beiträge aus TRANSENS (Sessions, Workshops und Vortragsbeiträge) koordiniert; ein konsolidierter Beitrag über die transdisziplinäre Arbeit in TRANSENS wurde geleistet. Die TRANSENS-Berichte Nr. 4 und 5 wurden redaktionell und organisatorisch zur Open-Access-Veröffentlichung gebracht. Die eingerichtete Online-Datenbank zu Veröffentlichungen wurde ebenso wie Homepage und Newsletter laufend weiterentwickelt. Eine neu eingerichtete „Kerngruppe Evaluation“ bereitet für das Gesamtprojekt die anstehende, formative Selbstevaluation vor. Zwei gemeinsame Treffen wurden durchgeführt und ein erstes Papier zu Schlussfolgerungen nach zwei Jahren Projektarbeit erstellt.

IELF (TAP SAFE): Im Zuge der empirischen TD-Forschung an der Schnittstelle mit der AGBe im Modul 3 wurde am 25.9.2021 ein erster Workshop zwischen der Arbeitsgruppe Bevölkerung (AGBe) und dem TAP SAFE online durchgeführt, der anschließend ausgewertet wurde. Über die Vermittlung von Basiswissen zum safety case an die Arbeitsgruppe Bevölkerung hinaus wurde das Co-Design der weiteren Treffen besprochen. Die Ergebnisse des Treffens wurde auf dem safeND-Forschungssymposium im Rahmen eines Vortrags vorgestellt. In Kooperation mit der GRS wurde vom 11. bis 12. Dezember der zweite AGBe-Termin in Hannover durchgeführt; eine interdisziplinäre Auswertung ist erfolgt und mit der Synthese der Ergebnisse wurde begonnen. Das gemeinsam entwickelte Thema waren FEP (Features, Events and Processes) im Safety Case. Die GRS war insbesondere mit dem Input und der Moderation vor Ort befasst.

LfDG: Die Entwicklung von multiphysikalischen Simulationen wurde fortgeführt. Die thermisch-hydraulisch-mechanischen (THM) Simulationen auf Lokalmittel-Ebene im Steinsalz konnten mittels FTK 3.0 berechnet werden, aufgrund der Rechenzeit jedoch nur für begrenzte Zeiträume (< 10.000 a). Die Weiterentwicklung des FTK-Simulators auf die Version 4.0 konnte abgeschlossen werden. Erste mechanische Simulationen im Tonstein am reduzierten Lokalmittel und dem 1- und 2-Sohlen Lokalmittel wurden durchgeführt. Hierbei zeigte sich jedoch noch weiterer Entwicklungsbedarf an dem Stoffmodell für Tonstein. Die multiphysikalischen Simulationen sollen im TAP TRUST und TAP SAFE dem Diskurs mit der AGBe dienen. TAP SAFE - spezifisch wurden die TH²M-Simulationsergebnisse des 1- und 2-Sohlen-Lokalmittel im Hinblick auf den sicherheitstechnischen Einfluss der Überfahrungssohle ausgewertet. Darüber hinaus wurde mit UK-A&O zu menschlichen Faktoren in numerischen Simulationen weitergearbeitet. TAP TRUST - spezifisch wurden die TH²M-Simulationsergebnisse des reduzierten Lokalmittels im Hinblick auf die Zustandsgrößenentwicklung von Monitoringparametern im Monitoringzeitraum ausgewertet. Des Weiteren wurden Informationen aus der Literatur zu drei Monitoringkonzeptionen in einer Bewertungsmatrix zusammengetragen.

risicare: risicare ist in der Person von Anne Eckhardt als Co-Sprecherin von TRANSENS in die Organisation des Gesamtprojektes eingebunden. Die Beiträge zum TAP SAFE umfassten Mitwirkung am TD-Experiment mit der AGBe und verschiedene Beiträge zum Thema Ungewissheiten, darunter Koordination und Beitrag zum TRANSENS-Bericht-04 „Sicherheitsrelevante Barrieren bei der Endlagerung: Ungewissheiten aus der Perspektive der Ingenieurwissenschaften“ sowie Vorbereitung und Mitwirkung bei vier Veranstaltungen zum TAP-übergreifenden Thema Ungewissheiten, intern wie auch extern, etwa beim Forschungssymposium safeND.

4. Geplante Weiterarbeiten

IELF (Koordination und Kommunikation): Im Anschluss an den Berichtszeitraum wird am 13. und 14.01. ein Klausurtreffen der Teamleitungen durchgeführt, welches pandemiebedingt statt in Clausthal digital stattfinden muss. Zeitnah steht die Begleitung des gemeinsam mit der ETH Zürich organisierten TRANSENS-Projekttreffens vom 16.-18.3. an sowie die Organisation von weiteren Veranstaltungen (Teamleitersitzungen, Arbeitstreffen im Herbst 2022 in Kiel). Es gibt eine Fortführung der jours fixes mit dem Beirat TD. Nächste Schritte zur Selbstevaluation von TRANSENS werden eingeleitet und koordiniert.

IELF (TAP SAFE): Nach bislang zwei durchgeführten SAFE-AGBe-Workshops ist der dritte in Planung und für das Frühjahr angesetzt. Eine notwendig gewordene Neueinstellung für die wiss. Mitarbeit in SAFE ist zum 1.4.2022 geplant, inkl. dann folgendem Arbeitsbeginn an Meilenstein 13 und Modul 7.

LfDG: Zukünftig soll das Stoffmodell Lux/Wolters/Lerche-T um eine transversale Elastizitätsmatrix erweitert und Simulationen am reduzierten Lokalmittel sowie am 1- und 2-Sohlen-Lokalmittel im Tonstein durchgeführt werden. Ein zweiter Workshop mit der AGBe zum Thema „Monitoring und Vertrauen“ sowie Weiterarbeit in Verbindung mit UK-A&O zu menschlichen Faktoren in numerischen Simulationen sind geplant.

risicare: Für das erste Halbjahr 2022 sind zwei Arbeitsschwerpunkte von risicare vorgesehen: 1. Beteiligung an der Durchführung des TD-Experiments mit der AGBe im TAP SAFE und 2. Koordination und Mitwirkung am Projekt eines interdisziplinären Sammelbands zum Thema Ungewissheiten.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Hassel, T. et al. (Hrsg.) (2021): Sicherheitsrelevante Barrieren bei der Endlagerung: Ungewissheiten aus der Perspektive der Ingenieurwissenschaften. TRANSENS-Bericht-04, ISSN (Online): 2747-4186, DOI: 10.21268/20211129-0

Othmer, J. A. et al. (2021): Transdisciplinary research on the topic of long-term near-field monitoring of a geological repository with a view to building trust, in: Safety of Nuclear Waste Disposal, Vol. 1 2021, S. 271–273, <https://sand.copernicus.org/articles/1/271/2021/>

Röhlig, K.-J. et al. (2021): Application-oriented transdisciplinary basic research on nuclear waste management: hollow phrase or sensible concept? in: Safety of Nuclear Waste Disposal, Vol. 1 2021, S. 203-204, DOI: <https://doi.org/10.5194/sand-1-203-2021>, <https://sand.copernicus.org/articles/1/203/2021/>

Röhlig, K.-J. et al. (2021): Transdisciplinary research on repository safety: challenges and opportunities, in: Safety of Nuclear Waste Disposal, Vol. 1 2021, S. 205-207, DOI: <https://doi.org/10.5194/sand-1-205-2021>, <https://sand.copernicus.org/articles/1/205/2021/>

Zuwendungsempfänger: Christian-Albrechts-Universität zu Kiel, Christian-Albrecht-Platz 4, 24118 Kiel		Förderkennzeichen: 02 E 11849B
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt B		
Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit Bereich D2: Sozio-technische Fragestellungen, Feld:2.1		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2019 bis 30.09.2024	Berichtszeitraum: 01.07.2021 bis 31.12.2021	
Gesamtkosten des Vorhabens: 1.375.945,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Ott	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

In TRANSENS soll transdisziplinär geforscht werden: Die interessierte Öffentlichkeit und andere außerakademische Akteure werden planvoll in Forschungskontexte, konkret in Transdisziplinäre Arbeitspakete (TAP) eingebunden.

Die Möglichkeiten transdisziplinärer Forschung in der nuklearen Entsorgung werden im Verbund systematisch reflektiert (Transdisziplinaritätsforschung). Spezielle Aktivitäten zielen auf Nachwuchsförderung und Kompetenzerhalt.

Die Antragstellenden der CAU sind Projektpartner im TAP DIPRO.

Dialog und Diskurs sind Schlüssel zur Verständigung. Wie muss der langwierige Prozess gestaltet werden, um dafür gute Bedingungen auf dem Entsorgungspfad zu schaffen? Das ist Gegenstand der transdisziplinären Forschung im TAP DIPRO.

Am Philosophischen Seminar und am Institut für Informatik werden in interdisziplinärer Kooperation (i) Narrative des Entsorgungsdiskurses analysiert, (ii) eine Theorie von "wicked communication" entwickelt, (iii) gesellschaftliche Steuerungsmedien bewertet, (iv) Nachvollziehbarkeit und Transparenz des Entsorgungsprozesses wissenschaftstheoretisch untersucht und über Visualisierungen für den transdisziplinären Forschungsmodus aufbereitet, unterstützend wird hierzu (v) eine Multimediawerkstatt aufgebaut.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Das Arbeitsprogramm in DIPRO zeichnet sich durch eine disziplinäre Aufbereitung von Sachverhalten, die interdisziplinäre Verständigung darüber und im Kern der Forschungsarbeit durch Workshops aus, bei denen verschiedene transdisziplinäre Formate entsprechend der Themensetzung zur Anwendung kommen werden. Im ersten Projektjahr soll zudem eine eigens für DIPRO gebildete Begleitgruppe aus wenigen Laien eingesetzt werden, die die Gestaltung und die Inhalte der Workshops über die Projektlaufzeit hin reflektiert.

Die zentralen Forschungsfragen, die DIPRO an die Begleitgruppe und die Workshops stellt, sind:

1. Welche normativen Voraussetzungen, praktischen Anforderungen und gesellschaftlichen Erwartungen gilt es, für ein gerechtes und resilientes Verfahren und den jeweiligen Entsorgungspfad zu berücksichtigen?
2. Welche gesellschaftlichen Erwartungen und Ansprüche an eine zielführende Endlager-Governance und Öffentlichkeitsbeteiligung lassen sich identifizieren und wie können diese in politische Maßnahmen einfließen?
3. Wie ist das Standortauswahlverfahren unter Bedingungen von „wicked problems“ und „wicked communication“ im Sinne von „good governance“ auszugestalten?

Neben anwendungsorientierter Grundlagenforschung (desk-research, Experimente) bestehen die wesentlichen Arbeitspunkte des Kieler Teilprojektes in der Entwicklung, Durchführung und Evaluation transdisziplinärer Formate (Workshops, Multimediawerkstatt, Informationsdesigns). Inhaltliche Schwerpunkte liegen auf Verfahrensgerechtigkeit, Kommunikation und Standortverantwortung.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- Weiterentwicklung Kommunikationsstrukturen innerhalb DIPROs
- Fortsetzung Aufarbeitung des Forschungsstandes inter- und transdisziplinärer Forschung zur nuklearen Sicherheit

- Vorträge auf dem TRANSENS-Projekttreffen in Braunschweig (19.-21.07.2021):
 - o „Überblick und Einführung“ (M. Berg, U. Smeddinck)
 - o „Beteiligung, Verfahrensgerechtigkeit und Standortauswahl“ (R. Sierra)
 - o „Verbesserung des Dialogs bei der Endlagersuche“ Ergebnispräsentation + Diskussion WebGIS-Projekt (P. Bräuer, L. Schwarz)
- Vorträge auf dem TRANSENS-Arbeitstreffen in Berlin (06.-08.10.2021):
 - o Erfahrungen und Herausforderungen digitaler transdisziplinärer Formate in komplexen und konfliktiven Forschungsfeldern (R. Sierra, L. Schwarz, M. Mbah, P. Bräuer, F. Becker, D. Themann)
- Vorbereitung und Durchführung von Workshop C an der CAU Kiel, 06.-07.11.2021
- Zusammenfassung des Workshops C für die Projekthomepage
- Kontinuierliche Arbeit mit der DIPRO-Begleitgruppe (DBG): monatliche Teeküche; Inhaltlicher Workshop zu
 - a) Verstärkung der Forschungsthemen und Entwurf eines Arbeitsplans (23.10.2021 online)
 - b) Vorbereitung von Impulsvorträgen für den Workshop C (28.10.2021); Teilnahme der DBG an den TRANSENS-Treffen im Juli und Oktober
- Weiterentwicklung des TD-Konzeptes mit Blick auf die Zwischenevaluierung
- Schulungen in TD-Rekrutierung von Praxisakteuren
- Erarbeitung und Präsentation von Exposés (Kapitelbeiträge) für den TAP-übergreifenden Sammelband zum Thema Ungewissheiten (siehe auch geplante Weiterarbeiten): Teilnahme am Vorbereitungs-Workshop (07.12.2021)
- Durchführung der transdisziplinären WebGIS-Studie der Multimedia-Werkstatt (13.12.21 online)
- Durchführung eines Workshops auf der International Transdisciplinarity Conference 2021 (online) in Zusammenarbeit mit TAP-TRUST und TAP-HAFF
- Begriffsarbeit wicked communication; Veröffentlichungen geplant
- Erstellung 2. Arbeitsbericht: Koproduktion mit DBG
- Vorstellung von Projektergebnissen auf wissenschaftlichen Fachkonferenzen, z. B. Internationales Symposium für Informationswissenschaft und SafeNd

4. Geplante Weiterarbeiten

- Aufbereitung der Ergebnisse von Workshop C zu Verfahrensgerechtigkeit und politischer Kommunikation (01-02/2022)
- Vorbereitung des TRANSENS-Arbeitstreffens in Kiel (Durchführung 10/2022)
- Beschließung eines Arbeitsplans mit der DBG für das Jahr 2022 (01/2022)
- Vorbereitung der DIPRO-Teilnahme am TRANSENS-Projekttreffen in Zürich (03/2022)
- Mitarbeit an Workshop D zu Freiwilligkeit und Kompensationen (05/22)
- Mitarbeit an Workshop B zum Wicked Problem im Naturkundemuseum Berlin (Sommer 2022)
- Vorbereitungen Workshop E-1 (geplant Herbst 2022)
- Verfassung von 2 Beiträgen für den Sammelband Ungewissheiten
 - o R. Sierra, Die Rolle von Hoffnung und Zuversicht beim individuellen und kollektiven Umgang mit Ungewissheiten
 - o M. Berg, F. Becker, Ungewissheiten und Narrative
- Aufbereitung der Ergebnisse von WebGIS und Workshop zur Vorstellung und transdisziplinären Reflexion der Ergebnisse (Frühjahr 2022)

5. Berichte, Veröffentlichungen

Schwarz, L., & Bräuer, P. (2021). Improving Participation in the German Search for a Nuclear Waste Repository Site: A WebGIS as a Transdisciplinary Approach to Support Dialogue? *Safety of Nuclear Waste Disposal*, 1, 209–210. <https://doi.org/10.5194/sand-1-209-2021>

Ott, Konrad: Ethical Aspects of High Level Nuclear Waste Management. In: Klaus Röhlig (Ed.): *Nuclear Waste. Management, Disposal and Governance*. IOP Publishing (forthcoming)

Zuwendungsempfänger: Freie Universität Berlin, Kaiserswerther Str. 16-18, 14195 Berlin	Förderkennzeichen: 02 E 11849C
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt C	
Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit Bereich D2: Sozio-technische Fragestellungen, Feld:2.3	
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2019 bis 30.09.2024	Berichtszeitraum: 01.07.2021 bis 31.12.2021
Gesamtkosten des Vorhabens: 991.894,00 EUR	Projektleiter: Dr. Brunnengräber

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

In TRANSENS wird transdisziplinär geforscht: Die interessierte Öffentlichkeit und andere außerakademische Akteure werden planvoll in Forschungskontexte, konkret in Transdisziplinäre Arbeitspakete (TAP), eingebunden. Die Analyse der transdisziplinären Forschungsaktivitäten soll Hinweise liefern, wie die Kommunikation zwischen Wissenschaft und den Beteiligten des Standortauswahlverfahrens und der Bevölkerung verbessert werden kann. Spezielle Aktivitäten zielen auf Aus- und Weiterbildung sowie auf Nachwuchsförderung und Kompetenzerhalt.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Die FU Berlin ist zentral am TAP DIPRO beteiligt: Dialoge und Prozessgestaltung in Wechselwirkung von Recht, Gerechtigkeit und Governance.

Untersucht werden in interdisziplinärer Kooperation und mittels transdisziplinärer Formate:

- Narrative und Frames der Entsorgungsdiskurse/wicked communication,
- Charakteristika von wicked problems aus dialogischer Perspektive,
- Wissensbestände und vertrauensbildende Wissensaufbereitung und –vermittlung sowie
- Formen und Medien der Regulierung.

Die FU Berlin ist zudem in die Transdisziplinäre Begleitung eingebunden (TD-Begleitung). Hier erfolgt die formative und reflektierende Begleitung der TAP-Forschenden und der am Forschungsprozess beteiligten Öffentlichkeit wie der außerakademischen Akteure.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- Neun Vorträge bei nationalen und internationalen Fachtagungen
- Drei Veröffentlichungen in Journals, ein Zeitungsbeitrag
- Ein TAP-übergreifender Workshop bei safeND (in Koop. mit TRANSENS-Partnern)
- Mitarbeit beim TRANSENS-internen Workshop „Unsicherheiten“

DIPRO:

- Ausbau der Zusammenarbeit mit der DIPRO-Begleitgruppe (DBG); Durchführung mehrerer Treffen; Identifizierung gemeinsamer Forschungsthemen
- Begleitforschung zur der Fachkonferenz Teilgebiete in Darmstadt (FKTG III)
- Fortführung der Konzeption von Workshop B

- Fortführung der Konzeption von zwei Fachworkshops: I. Zur Öffentlichkeitsbeteiligung, II. Zum Science-Policy Interface
 - Arbeit an peer-reviewed Veröffentlichungen: 1. Konzeptpapier zum „weichen Endlagerstaat“, 2. Kompensation, 3. Konzeptpapier „Gute Öffentlichkeitsbeteiligung“, 5. Synthesepapier zur Fachkonferenz Teilgebiete, 6. Gender-Dimensionen der bundesdeutschen Endlager-Governance
 - Teilnahme am DIPRO-Workshop in Kiel
 - Arbeit mit DIPRO-Begleitgruppe zum WebGIS als Dialogmittel (Koop. mit CAU Kiel)
- BegleitTeam.TD:
- TelKos zur Vorbereitung und Unterstützung bei online Treffen mit TD-Beauftragten
 - Auswertung aktueller Literatur zur Transdisziplinaritätsforschung und Fertigstellung des Entwurfs für eine Veröffentlichung zu „TD und Endlager-Governance/Risikoforschung“

4. Geplante Weiterarbeiten

- Zusammenfassung der Ergebnisse der FK TG-Beobachtung; Veröffentlichung im Forschungsjournal SB
- Weiterarbeit am Paper, das bei der ECPR vorgestellt wurde; Einreichung bei einem Journal (peer-reviewed)
- Fertigstellung des Manuskripts zu „Transdisziplinarität“
- Fertigstellung des Konzeptpapiers „Gute Öffentlichkeitsbeteiligung“
- Organisation und Durchführung des Workshop B sowie der Workshops I/II

5. Berichte, Veröffentlichungen

VORTRÄGE:

Themann, D. „Wie bringen wir das zu(r W)ende“; Stiftung Leben und Umwelt (SLU), 29.11.21; „Wie schrumpft man die großen Teilgebiete?“, Ev. Akademie Loccum, 26.11.21; „From a ‘hard nuclear state’ towards a ‘soft nuclear repository state’ ECPR 30.8.21 / safeND-BASE 13.11.21
 Schwarz, L. „Justice in dealing with highly radioactive waste“, safeND-BASE 11.11.21; mit Bräuer, P. „Improving Participation in the German Search for a Nuclear Waste Repository Site: a WebGIS as a Transdisciplinary Approach“ safeND-BASE 11.11.21; Schwarz, L. „Räumliche Gerechtigkeit im Standortsuchprozess für ein Endlager“, GeoWoche 2021

VERÖFFENTLICHUNGEN:

Schwarz, Themann, Brunnengräber (2021): Räume erobern, öffnen und verteidigen, in: Forschungsjournal NSB Plus, 34 (4), (online)

Schwarz, Themann, Brunnengräber (2021): Von Machtasymmetrien zu flachen Hierarchien im Standortsuchprozess für ein Endlager? in: Forschungsjournal NSB Plus, 34 (3) (online)

Brunnengräber (2021): Das Kapitalozän ist das eigentliche Problem. Atommüll im Menschenzeitalter, in: Politische Ökologie 167, 32-38

Brunnengräber, Achim (2021): Wanted – der weiche Endlagerstaat, Berliner Zeitung. 05.08.2021

Zuwendungsempfänger: Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Hermann-von-Helmholtz-Platz 1, 76344 Eggenstein-Leopoldshafen		Förderkennzeichen: 02 E 11849D
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt D		
Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit Bereich D2: Sozio-technische Fragestellungen, Feld:2.1		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2019 bis 30.09.2024	Berichtszeitraum: 01.07.2021 bis 31.12.2021	
Gesamtkosten des Vorhabens: 550.967,50 EUR	Projektleiter: Dr. Metz	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

In TRANSENS soll transdisziplinär zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland geforscht werden. Die interessierte Öffentlichkeit und andere außerakademische Akteure werden planvoll in Forschungskontexte, konkret in Transdisziplinäre Arbeitspakete (TAP) eingebunden. Die Möglichkeiten transdisziplinärer Forschung in der nuklearen Entsorgung werden im Verbund systematisch reflektiert (Transdisziplinaritätsforschung). Spezielle Aktivitäten zielen auf Nachwuchsförderung und Kompetenzerhalt.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Die Schwerpunkte der Arbeiten des KIT-INE liegen im Modul „Pfadabhängigkeit als Risiko und Herausforderung“ des TAP „Handlungsfähigkeit und Flexibilität in einem reversiblen Verfahren“ (HAFF). Unsere Arbeiten gliedern sich in das

AP1: „Sicherung von Handlungsfähigkeit im Standortauswahlverfahren und der Betriebsphase“ und das AP2: „Technische und verfahrenstechnische Komponenten von Entsorgungspfaden und deren Nebenfolgen“.

In diesem Modul werden von uns Fragestellungen überprüft, die im Kontext des Standortauswahlverfahrens für Wärme entwickelnde Abfälle hinsichtlich Reflexivität und Reversibilität des Verfahrens von besonderer Bedeutung sind. Hierzu werden Arbeiten zur Zwischenlagerung und Entwicklung von Tiefenlagersystemen unter Berücksichtigung der technischen Barrieren und deren Implikationen durchgeführt, wobei insbesondere die Verknüpfung von Infrastruktur-, Strahlenschutz- und Betriebssicherheitsaspekten verschiedener Komponenten des Entsorgungspfads analysiert werden. Im weiteren Verlauf des Verbundvorhabens soll gemeinsam mit Partnern des TAP HAFF Haltepunkte definiert werden, an denen der jeweilige Sicherheitsstatus eines Entsorgungspfads überprüft und ein Dialog mit der Bevölkerung angestrebt wird.

Zusammenarbeit im Forschungsverbund TRANSENS: Das Arbeitspaket 2 „Technische und verfahrenstechnische Komponenten von Entsorgungspfaden und deren Nebenfolgen“ wird durch einen Mitarbeiter des KIT-INE geleitet.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im zweiten Halbjahr 2021 beschäftigten wir uns zum einen mit dem Beitrag des KIT-INE am TRANSENS-HAFF Arbeitsbericht Nr. 1 zu „Verzahnungen, Haltepunkte und Wissenskonflikte“. In diesem Bericht werden unter anderem als „Kristallisationskerne“ bezeichnete Kooperationen innerhalb des TAP HAFF beschrieben, da sich an „Kristallisationskerne“ einige der zentralen gemeinsamen Problemstel-

lungen und Forschungsfragen über die verschiedenen Institutionen des TAP hinweg gemeinsam bearbeitet werden können. Wir arbeiten hauptsächlich zum Kristallisationskern (K1) „Verknüpfungen und Interdependenzen langfristiger Entsorgungspfade – Analyse, grafische Darstellung und Illustration“ und beteiligen und darüber hinaus am Kristallisationskern (K2) „Haltepunkte –Erwartungen und Optionen der Ausgestaltung“.

Der inhaltliche Fokus unserer Arbeiten lag auf Untersuchungen zu Interdependenzen zwischen Zwischen- und Endlagerung und deren wechselseitigen Implikationen. Dabei ergibt sich eine mehrdimensionale "Entsorgungslandschaft" aus der Betrachtung von (verfahrens-) technischen Schritten, technischen Alternativen, Verknüpfungen, Abhängigkeiten und daraus resultierenden Sachzwängen. Im jahrzehntelangen Entsorgungsprozess sind beabsichtigte und unvorhergesehene Haltepunkte zu berücksichtigen und zu analysieren sowie Entscheidungskriterien für die Vorgehensweise zu entwickeln. Gesellschaftliche Konflikte ergeben sich aus unterschiedlichen Interessen (z. B. der Bevölkerung an Zwischenlagerstandorten), die mit sicherheitsrelevanten Ansichten und Erwartungen der Bevölkerung in Beziehung gesetzt werden müssen.

Erste Erfahrungen mit einem größeren Publikum hinsichtlich Transdisziplinarität konnte F. Becker auf der „International Transdisciplinarity Conference 2021“, die vom 13.–17. September 2021 online stattfand, gewinnen. Zusammen mit Kolleginnen und Kollegen mehrerer TAPs von TRANSENS wurde dort der Beitrag „Experiences and challenges of digital transdisciplinary formats (td-formats) in complex and contested research fields“ mittels Impulsvorträgen vorgestellt und in Diskussionsrunden weiterentwickelt.

F. Becker (der TD-Beauftragte des KIT-INE) und V. Metz beteiligten sich mit Vorträgen und anderen Beiträgen an einer Reihe von virtuellen Treffen (online Besprechungen) zum TRANSENS-Projekt, der transdisziplinären Arbeit und dem TAP HAFF. Dazu gehören die regelmäßigen Treffen „TRANSENS HAFF jour fixe“, das TRANSENS-Projekttreffen in Braunschweig vom 19. bis 21. Juli 2021, mehrere Online-Treffen zum interdisziplinären TRANSENS-Bericht zu Ungewissheiten, das TRANSENS-Arbeitstreffen in Berlin vom 6. bis 8. August 2021, die TRANSENS „Bearbeiter*innen“ Treffen am 21. Juli und 14. Dezember 2021 sowie die Treffen der TD-Beauftragten am 8. Juli und 28. Oktober 2021.

4. Geplante Weiterarbeiten

Auf Basis des Kapitels zum Kristallisationskern K1 des TRANSENS-HAFF Arbeitsberichts Nr. 1 soll mit weiteren Mitarbeiterinnen und Mitarbeitern von HAFF die Pfadidentifikation und Folgenanalyse weiterentwickelt und mit den Arbeiten zur vergleichenden Pfadheuristik abgestimmt werden. Darauf aufbauend soll eine grafische Darstellung zur Illustration potentieller, verzweigter und miteinander verknüpfter Entsorgungspfade entwickelt werden. Die Grundlagen zum interdisziplinären TRANSENS-Bericht zu Ungewissheiten sollen entwickelt werden.

Die Auswahl, Einstellung und Einarbeitung einer geeigneten Kandidatin oder eines geeigneten Kandidaten für die Promotionsstelle wurde aufgrund der Einschränkungen durch COVID-19 bedingt auf das erste Halbjahr 2022 verschoben.

Neben einigen virtuellen Treffen im Arbeitspaket TAP HAFF ist eine Teilnahme am TRANSENS Projekttreffen vom 16. bis 18. März 2022 an der ETH Zürich vorgesehen.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Rosa Sierra, Melanie Mbah, Lucas Schwarz, Dörte Themann, Christina Benighaus, Frank Becker, Paula Bräuer: „Experiences and challenges of digital transdisciplinary formats (td-formats) in complex and contested research fields“, International Transdisciplinarity Conference 2021, Creating Spaces and Cultivating Mindsets for Learning and Experimentation, Online, 13.-17. September 2021, https://api.swiss-academies.ch/site/assets/files/36859/itd2021_conferencebooklet_8sep_-_corr_time_zones.pdf

HAFF-Arbeitsbericht Nr. 1: „Verzahnungen, Haltepunkte und Wissenskonflikte. Zum Startpunkt und der Verknüpfung der Module und Arbeitspakete im TAP ‚Handlungsfähigkeit und Flexibilität‘“, von Peter Hocke, Elske Bechthold, Frank Becker, Sina Bremer, Bettina Brohmann, Stefanie Enderle, Thomas Hassel, Thorsten Leusmann, Dirk Lowke, Melanie Mbah, Volker Metz, Julia Neles, Dirk Scheer, Oliver Sträter

Zuwendungsempfänger: Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Hermann-von-Helmholtz-Platz 1, 76344 Eggenstein-Leopoldshafen		Förderkennzeichen: 02 E 11849E
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt E		
Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit Bereich D2: Sozio-technische Fragestellungen, Feld:2.1		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2019 bis 30.09.2024	Berichtszeitraum: 01.07.2021 bis 31.12.2021	
Gesamtkosten des Vorhabens: 2.720.831,00 EUR	Projektleiter: Dr. Hocke-Bergler	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

In TRANSENS soll transdisziplinär zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland geforscht werden. Die interessierte Öffentlichkeit und andere außerakademische Akteure werden planvoll in Forschungskontexte, konkret in Transdisziplinäre Arbeitspakete (TAP) eingebunden. Die Möglichkeiten transdisziplinärer Forschung in der nuklearen Entsorgung werden im Verbund systematisch reflektiert (Transdisziplinaritätsforschung). Spezielle Aktivitäten zielen auf Nachwuchsförderung und Kompetenzerhalt.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Die ITAS-Schwerpunkte liegen im TAP HAFF und im TAP DIPRO. Wir leisten Grundlagenforschung zu Fragen der Reversibilität und des gesellschaftlichen Dialogs, die im deutschen Standortauswahlverfahren eine besondere Rolle spielen.

TAP HAFF: „Handlungsfähigkeit und Flexibilität in einem reversiblen Verfahren“ mit den Themen Pfadabhängigkeit als Risiko und Herausforderung, Raumwirkungen vor dem Hintergrund von Endlager-Governance sowie technische und verfahrenstechnische Komponenten von Entsorgungspfaden und deren Nebenfolgen.

TAP DIPRO: „Dialoge und Prozessgestaltung in Wechselwirkung von Recht, Gerechtigkeit und Governance“, mit dem Thema Gerechtigkeit als Ausgangspunkt. Gerechtigkeitsfragen haben insbesondere bei Projekten wie der Standortsuche und der Realisierung eines Endlagers einen hohen gesellschaftlichen Stellenwert.

Zusammenarbeit im Forschungsverbund:

Mit dem TAP SAFE wird empirisch kooperiert. Ebenso kooperiert ITAS im Rahmen der Transdisziplinaritätsforschung mit den TD-Experten innerhalb des Forschungsverbundes (I-TD und BegleitTeam.TD). ITAS ist im Sprecherteam des Forschungsverbundes ebenso vertreten wie in der I-TD (2 Mitarbeiter). TAP HAFF und TAP DIPRO werden jeweils durch einen ITAS-Mitarbeiter geleitet.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

TAP HAFF: Das ITAS-AP „Verwaltungshandeln in einem bundesdeutschen reversiblen Verfahren für die aktuelle Suche nach einem Endlagerstandort für hochradioaktive Abfälle“ ist ein mehrstufiges Interview-Projekt, das untersucht, mit welchen Herausforderungen Verwaltungshandeln im Zusammenhang mit dem aktuellen Standortauswahlverfahren für ein Endlager für hochradioaktive Abfälle ausgesetzt ist. Im Mittelpunkt steht dabei die Frage, welche Aspekte des selbstreflexiven Verfahrens nach StandAG welche neuen Gestaltungsräume anbieten und wo die Herausforderungen liegen. Empirisch und explorativ wird dabei die Möglichkeit eröffnet, lineare Pfadabhängigkeiten aufzubrechen, um so alternative Optionen der Entscheidungsvorbereitung und -reflexion anzubieten und diese als Instrument der Fehler- und Sicherheitskultur im Sinne Sträters fruchtbar zu machen. Die Pretests sind Ende des Jahres angelaufen.

Das ITAS-Teilprojekt „Zukunftspfade Endlager – Entwicklung und Analyse eine Pfadheuristik unter dem Paradigmen Handlungsfähigkeit und Flexibilität in einem reversiblen Verfahren“ hat seine Konzeptentwicklung abgeschlossen und arbeitet aktuell mit HAFF-Partnern federführend zu einer kleinen Zahl von Entsorgungspfaden, die neben dem eingeschlagenen Entsorgungspfad mögliche Knotenpunkte berücksichtigt, die eng angelehnt an den Plan des

StandAG oder vorstellbar sind. Dabei werden insbesondere Entscheidungsalternativen mitberücksichtigt, die ohne das angestrebte Ziel der Standortauswahl für ein HAW-Endlager im tiefen geologischen Untergrund aufzugeben als Handlungsalternativen jenseits des Status quo abgewogen werden könnten. Das dabei einzuübende Denken in Alternativen wird grafisch und inhaltlich ausgearbeitet.

Im Rahmen der HAFF-Leitung wurden inhaltliche Ziele und Arbeitsteilungen präzisiert und für 2022 festgehalten. Dazu gehören insbesondere vertiefte HAFF-Kooperationen mit dem KIT-INE, dem TUB-iBMB und dem LUH-IW sowie dem Öko-Institut sowie dem TAP-SAFE.

TAP DIPRO: In diesem TAP standen sowohl transdisziplinäre als auch disziplinäre Arbeiten im Vordergrund. Sowohl bei der thematischen Nachjustierung als auch inhaltlich nahm die DIPRO-Begleitgruppe (DBG) ihre kontinuierlichen Arbeiten auf. Gemeinsame Workshops und die Zusammenarbeit bei einem gemeinsamen Arbeitstreffen in Berlin mit allen TRANSENS-Teams sowie erste Vorträge aus der DBG eröffneten eine Fortschreibung der gemeinsamen Ausarbeitung transdisziplinärer Zwischenergebnisse. Über eine Teambuilding-Maßnahme mit der DBG wurden deren inhaltliche Interessen identifiziert. Die DBG präzisierte dabei ihre Vorstellungen über Gerechtigkeit und Dialog. Mit der DBG wurde ein gemeinsamer Arbeitsplan für 2022 entwickelt. Das DBG-Interesse an Kommunikation, Gerechtigkeit und pluraler Öffentlichkeit wird in Ausgestaltung und Durchführung der DIPRO strukturierenden Workshops integriert. Der DIPRO-Workshop D („Freiwilligkeit und Kompensationen“) ist in Planung.

Vertiefte Kooperationen gibt es u. a. mit dem FAO/Kassel und risicare sowie dem FFU und der CAU.

Disziplinär starteten die Arbeiten zur erweiterten 2. Auflage des Kommentars zum StandAG, dessen Veröffentlichung in der zweiten Projekthälfte vorgesehen ist. Wichtige Arbeiten zum Endlagerdialog, Kernfragen der Regulierung und dazugehörige Narrative sind weitgehend veröffentlicht.

TAP SAFE: im 2. Halbjahr 2021 beriet ITAS das SAFE-Kernteam bei der Umsetzung eines Workshop-Formats mit Mitgliedern aus der zweiten TRANSENS-Begleitgruppe (AGBe), die am TAP SAFE angedockt ist.

TAP EDU: Fortführung des ITAS-Textseminars zu einschlägiger Forschungsliteratur, die sowohl transdisziplinäre Themen aufgreifen als auch interdisziplinäre neue Wissensbestände für HAFF und DIPRO erschließen. Die Vorlesung zum Umweltrecht an der KIT-Fakultät für Bauingenieur-, Geo- und Umweltwissenschaften wird im Wintersemester ebenfalls durchgeführt und Aspekte der Bürgerbeteiligung und das Standortauswahlgesetz vertieft.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Fortschreibung der Planung für die transdisziplinären Elemente, für die ITAS in HAFF und DIPRO verantwortlich ist.
- Umsetzung der Vorhaben aus dem 1. HAFF-Arbeitsbericht „Verzahnungen, Haltepunkte und Wissenskonflikte“, der im Herbst finalisiert wurde.
- Konzeptentwicklung und Pretest für das ITAS-HAFF-AP „Lernen in einem reversiblen Verfahren“, das sich mit den innovativen Verfahrenselementen und der Herausforderung für Verwaltungshandeln auseinandersetzt.
- Vorbereitung eines weiteren DIPRO-TRANSENS-Berichts sowie mehrerer Aufsätze aus dem DIPRO-Kontext
- Fortführung und Planung neuer Weiterbildungsaktivitäten zum Thema „TA und Governance im selbstlernenden Verfahren“, in EDU und Umsetzung bei einem nationalen TRANSENS-Treffen.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Bechthold, E. (2021): Die Kunst der Langfristigkeit. Book review. In: TATuP 30/2, S. 65f.

Enderle, S., Hocke, P. (2021): Narratives and images of the future for final disposal. In: Safety of Nuclear Waste Disposal 1, S. 193–194. DOI: 10.5194/sand-1-193-2021.

Frölich, Nina (2021): Die Kommunikation von wicked problems – An den Beispielen der Endlagersuche und des Autonomen Fahrens, Karlsruhe. ITAS-TRANSENS-Paper Nr. 3.

Hocke, P. (2021): Endlagerung hochradioaktiver Abfälle, In: Handbuch Technikethik, In: Handbuch Technikethik, Hg. A. Grunwald / R. Hillerbrand, J.B. Metzler, S. 388-392, doi.org/10.1007/978-3-476-04901-8_74

Hocke, P., et al. (2021): Verzahnungen, Haltepunkte und Wissenskonflikte. Zum Startpunkt und der Verknüpfung Module und Arbeitspakete im TAP „Handlungsfähigkeit und Flexibilität“, Karlsruhe: HAFF-Arbeitsbericht Nr. 1 (ITAS-TRANSENS-Paper, Nr. 2)

Röhlig, K.-J. et al. (2021): Transdisciplinary research on repository safety: challenges and opportunities. In: Safety of Nuclear Waste Disposal 1, S. 205-207, DOI: <https://doi.org/10.5194/sand-1-205-2021>

Röhlig, K.-J. et al. (2021): Application-oriented transdisciplinary basic research on nuclear waste management: hollow phrase or sensible concept? Saf. Nucl. Waste Disposal, 1, 203–204, Transens-Autor:innen u. ein Mitglied der DIPRO-Begleitgruppe, doi.org/10.5194/sand-1-203-2021

Smeddinck, U. (2021): Does gentle regulation have a chance? Saf. Nucl. Waste Disposal, 1, 311–311, doi.org/10.5194/sand-1-311-2021

Smeddinck, Ulrich (2021a): Infrastruktur und Öffentlichkeitsbeteiligung – Effizienz oder Nähe? Legalplanung, Standortauswahlgesetz, Online-Beteiligung, Zeitschrift für Rechtspolitik 54/7, 209 - 211

Smeddinck, Ulrich (2021b): Standortauswahlgesetz und „Gegen-Demokratie“ – Der Rechtsrahmen der „Endlagersuche“ im Spiegel von Rosanvillons Demokratie-Analysen, Verwaltungs-Archiv 112/4, 490 - 508

Zuwendungsempfänger: Leibniz Universität Hannover, Welfengarten 1, 30167 Hannover		Förderkennzeichen: 02 E 11849F
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt F		
Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit Bereich D2: Sozio-technische Fragestellungen, Feld:2.1		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2019 bis 30.09.2024	Berichtszeitraum: 01.07.2021 bis 31.12.2021	
Gesamtkosten des Vorhabens: 3.473.288,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Walther	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

In TRANSENS soll transdisziplinär geforscht werden: Die interessierte Öffentlichkeit und andere außerakademische Akteure werden planvoll in Forschungskontexte, konkret in Transdisziplinäre Arbeitspakete (TAP) eingebunden. Die Möglichkeiten transdisziplinärer Forschung in der nuklearen Entsorgung werden im Verbund systematisch reflektiert (Transdisziplinaritätsforschung). Spezielle Aktivitäten zielen auf Nachwuchsförderung und Kompetenzerhalt. LUH IRS/IW und ETH Zürich tragen zu allen vier TAP bei: Flexibilität statt linearer Ablauf des Verfahrens: schrittweises Vorgehen, Haltepunkte im Verfahrensablauf, die Option von begründeten Rückschritten und die Reaktion auf neue Forschungsergebnisse sind die Themen der transdisziplinären Forschung im TAP HAFF. Dialog und Diskurs sind Schlüssel zur Verständigung. Wie muss der langwierige Prozess gestaltet werden, um dafür gute Bedingungen auf dem Entsorgungspfad zu schaffen? Das ist Gegenstand der transdisziplinären Forschung im TAP DIPRO. In einem Verfahren, das die Rückholung eingelagerter Abfälle im Falle einer ungünstigen Entwicklung des Lagers vorsieht, muss man sich frühzeitig Gedanken machen über Monitoring-Strategien, Entscheidungswege, Entscheidungsträger und Verantwortlichkeiten. Dies ist Gegenstand des TAP TRUST. Im TAP SAFE wird transdisziplinär untersucht, ob und inwieweit Sichtweisen von Nicht-Spezialisten nahelegen, das Konzept des Safety Case anzupassen oder weiterzuentwickeln, um so die Diskurs- und Beratungsfähigkeit zu verbessern.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

IRS:

TAP TRUST: Modul 1: Übergreifender Rahmen des TAP TRUST und Leitung der AGBe
Modul 2: Transdisziplinäre Erarbeitung eines Programms zur Umweltüberwachung
TAP SAFE: Modul 6: Die Rolle der radioökologischen Modellierung im Safety Case
EDU: Aus- und Weiterbildung

IW:

TAP HAFF: Modul 1: Pfadabhängigkeit als Risiko und Herausforderung
Modul 2: Raumwirkungen und Governance
Modul 3: Konzeptionelle Grundlagen und Basisinformationen
TAP DIPRO: Workshop D: Darstellung technischer Randbedingungen
Workshop F: Transdisciplinarity meets reality – Lessons learned

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

IRS: TAP TRUST (Modul 1): Am 24./25.09. fanden Workshops zu den Themen Rückholung und Safety Case mit der AGBe statt. In Kooperation mit TAP SAFE hat am 12.11. zudem ein Intensivworkshop mit der AGBe zum Safety Case stattgefunden. Der Bericht zur Bevölkerungsumfrage wurde als TRANSENS-Bericht Nr. 5 und ein Beitrag in der Zeitschrift des Fachverbandes für Strahlenschutz (FS e.V.) veröffentlicht. Das Manuskript für die Fachzeitschrift Risk Analysis wurde überarbeitet und akzeptiert.

TAP TRUST (Modul 2): Die Messstelle konnte wie geplant im Oktober eingerichtet und in Betrieb genommen werden. Hierüber wurde die Öffentlichkeit am 13.10. via Pressetermin informiert. Hier gab es ein umfangreiches

Medienecho. Desweiterm wurde eine Internetpräsenz der Messstelle aufgebaut, über die sich interessierte Personen informieren sowie Kontakt aufnehmen können.

TAP SAFE (Modul 6): Die vakante Stelle wurde am 1.12. besetzt.

EDU: Die Ringvorlesung wurde und wird wie geplant einmal wöchentlich von abwechselnden Referenten aus dem Projekt gehalten. Der Vorlesungsplan für die Sommerschule wurde wie geplant in Zusammenarbeit mit den Partnern des Projektes erarbeitet.

IW: TAP HAFF: Bezogen auf die Ungewissheiten sind Arbeiten durchgeführt worden, mit welchen die Entscheidungsfindung für das System „Technische Barriere“ und der dafür notwendigen Begründungen erforscht werden. Hierzu wird in Zusammenarbeit mit KIT-ITAS ein TD-Modul „Cask Communications“ entwickelt, mit welchem die Kommunikationsfallstricke sowie die Notwendigkeit von variierenden Komplexitätsgrad im Wissensfundus erarbeitet werden.

IW: TAP DIPRO: Es wurde im Rahmen der TD-Taskforce mit der DIPRO-Begleitgruppe (DIPRO-BG) gearbeitet. Im Rahmen der Konsolidierung und Herstellung der Arbeitsbereitschaft wurde die gewählte Methodik innerhalb von TRANSENS als transdisziplinäre Arbeit dargestellt und diskutiert.

4. Geplante Weiterarbeiten

IRS: TAP TRUST (Modul 1): Vorbereitung von Beiträgen für das nächste TRANSENS-Arbeitstreffen (März 2022, Zürich). Entwicklung eines neuen Fragebogens für die geplante Durchführung einer zweiten repräsentativen Bevölkerungsumfrage und Konzeption der sich daran anschließenden psychologischen Experimente. Zwei weitere Workshops mit der AGBe zu den Themen Monitoring und Safety Case sind für das erste Quartal 2022 geplant.

TAP TRUST (Modul 2): Die Pandemie-bedingt verschobenen Termine sollen nachgeholt werden. Es wird eine verbesserte Ausstattung der Messstelle mit (als Spende akquirierten) Kontaminationsmessgeräten angestrebt, um das Messangebot zu erweitern. Diese Erweiterung soll insbesondere auch für die angestrebte Zusammenarbeit mit Schulklassen genutzt werden.

TAP SAFE (Modul 6): Es sollen die radioökologischen Modelle im deutschen gesetzlichen und untergesetzlichen Regelwerk gesichtet und speziell im Hinblick auf Überkonservativitäten ausgewertet werden.

(EDU): Die Ringvorlesung wird im kommenden Halbjahr fortgeführt, wobei der Fokus von den technischen Grundlagen stärker auf die sozioökonomischen Implikationen der Endlagersuche gelegt wird. Für die Sommerschule werden die finalen Vorbereitungen getroffen.

IW: TAP HAFF: Aufbereitung einer Wissensbasis zum Themenbereich technische Barriere zur Vorbereitung transdisziplinärer Wissensvermittlung unter dem Blickpunkt Komplexität/Vollständigkeit vs. Verständlichkeit/Vertrauen.

TAP DIPRO: Weitere Zusammenarbeit mit der DIPRO-Begleitgruppe zur Vorbereitung und Durchführung der geplanten Workshops. Aufarbeitung des zeitlichen Kontextes zur Behälterthematik mit der AG Kiel (M. Berg). Vorbereitung von Workshop D „Freiwilligkeit und Kompensation“ unter Betrachtung TAP übergreifender Forschungsergebnisse, wie z. B. der Endlagerbehälterthematik im Themenkorridor des TAP DIPRO.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Auswahl:

Drögemüller, C., Krütli, P., Röhlig, K.-J., Schulz, W., Seidl, R., Walther, C. (2021): Wissenschaft und Zivilgesellschaft: gemeinsame Forschung zur Entsorgung hoch radioaktiver Abfälle – das Verbundvorhaben TRANSENS, Strahlenschutzpraxis 03/21, S. 71-77, 27. Jahrgang. ISSN: 0947-434X

Hassel, T., Mintzlaff, V., Stahlmann, J., Röhlig, K.-J., Eckhardt, A. (2021): Sicherheitsrelevante Barrieren bei der Endlagerung: Ungewissheiten aus der Perspektive der Ingenieurwissenschaften. TRANSENS-Bericht 04. DOI: 10.21268/20211129-0

Seidl, R., Drögemüller, C., Krütli, P., Walther, C. (accepted): The Role of Trust and Risk Perception in Current German Nuclear Waste Management, Risk Analysis

Seidl, R. (2021): Vertrauen bei der Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland. Ergebnisse der bundesweiten Befragung. Hannover. TRANSENS-Bericht 05. DOI: 10.21268/20210921-3

Zuwendungsempfänger: Öko-Institut. Institut für angewandte Ökologie e. V., Merzhauser Str. 173, 79100 Freiburg im Breisgau		Förderkennzeichen: 02 E 11849G
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt G		
Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit Bereich D2: Sozio-technische Fragestellungen, Feld:2.1		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2019 bis 30.09.2024	Berichtszeitraum: 01.07.2021 bis 31.12.2021	
Gesamtkosten des Vorhabens: 505.379,00 EUR	Projektleiter: Dr. Brohmann	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

In TRANSENS soll transdisziplinär geforscht werden: Die interessierte Öffentlichkeit werden planvoll in Forschungskontexte, konkret in vier Transdisziplinäre Arbeitspakete (TAP) eingebunden. Die Möglichkeiten transdisziplinärer Forschung in der nuklearen Entsorgung werden im Verbund systematisch reflektiert (Transdisziplinaritätsforschung). Weitere Aktivitäten zielen auf Nachwuchsförderung und Kompetenzerhalt. Die Expertise des Öko-Instituts wird insbesondere in die TAPs HAFF und SAFE einbezogen.

Das TAP HAFF fokussiert auf die Flexibilität des Verfahrens, die statt eines linearen Ablaufs, ein schrittweises Vorgehen ermöglicht, das Haltepunkte im Ablauf und die Option von Rückschritten sowie die Reaktion auf neue Forschungsergebnisse vorsieht. Das TAP SAFE fokussiert u. a. auf Fragen der Kommunikation und des Umgangs mit Ungewissheiten im Rahmen des Safety Case (SC). Dabei wird transdisziplinär untersucht, ob und inwieweit Sichtweisen von Nicht-Spezialisten nahelegen, das Konzept des SC anzupassen oder weiterzuentwickeln.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

TAP HAFF: Handlungsfähigkeit und Flexibilität in einem reversiblen Verfahren

Das TAP gliedert sich in drei Module und beinhaltet folgende Arbeitsschritte:

- a) Literaturrecherche,
- b) Experten-Interviews zu Raumwirkungen von kerntechnischen Entsorgungsanlagen,
- c) Transdisziplinärer Workshop mit Praxisakteuren zu Umgang mit räumlichen Transformationen, Entwicklung eines raumsensiblen Long-term Governance-Konzeptes,
- d) Visuelles Experiment zur Wirkung von räumlichen Transformationen (Landschaftswandel) mit Praxisakteuren,
- e) Transdisziplinärer Workshop mit Stakeholdern und interessierter Öffentlichkeit zur Prüfung und Weiterentwicklung der konzeptionellen Ideen,
- f) Analyse der Interviews zur Entwicklung partizipativer Ausgestaltungsempfehlungen; Erfahrungen aus dem Schweizer Fall,
- g) Synthese der Ergebnisse und Entwicklung von Handlungsempfehlungen zum Umgang mit raumzeitlichen Spezifika unter Berücksichtigung von Haltepunkten und Rücksprüngen.

TAP SAFE: Stakeholder-Perspektiven und Transdisziplinarität

Das TAP gliedert sich in sieben Module, an vier Modulen ist das Öko-Institut beteiligt.

In SAFE 2 wird ein Beitrag zur methodischen Konzeption für die empirischen Untersuchungen mit transdisziplinärem Ansatz entwickelt. In SAFE 3 unterstützt das Öko-Institut den Diskurs zur Erfassung von Kriterien für einen SC. SAFE 4 widmet sich der Ergebnisdarstellung und Vermittlung

von Modellrechnungen unter Einbeziehung kommunikativer Anforderungen. SAFE 7 widmet sich der Auswertung und der Entwicklung von Empfehlungen der fortlaufenden Beobachtungen der Module 2, 3 und 4.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Vom 19. bis 21.7.21 fand ein TRANSENS Gesamttreffen in Präsenz und vom 6.10. bis 8.10.21 im hybriden Format statt. Am Gesamttreffen in Braunschweig haben wir Zwischenergebnisse aus dem Modul HAFF präsentiert. Am Gesamttreffen in Berlin haben wir Grundlagen zur formativen Evaluation auf der Basis bisheriger Arbeiten (Evalunet) vorgestellt. Für übergeordnete Aufgabenstellungen, wie beispielsweise für die Td Beauftragten oder im Zusammenhang mit der Evaluation des Vorhabens haben wir an verschiedenen Treffen teilgenommen und zur Erarbeitung von Leitfragen und Kriterien beigetragen. Im TAP HAFF wurden neben Arbeitstreffen in einzelnen Modulen auch die virtuellen Jours Fixes im 6-8 Wochenrhythmus fortgesetzt. Im TAP SAFE wurden die Arbeitstreffen digital durchgeführt.

TAP HAFF: Der Bericht zum Arbeitsstand im TAP wurde abgeschlossen. Modul 1: Unter dem Stichwort Zukunftspfade wurden verschiedene denkbare Entsorgungspfade definiert, für die im nächsten Schritt Pfadbeschreibungen erstellt werden. Modul 2: Die Expert*inneninterviews wurden ausgewertet. Ebenso wurde ein Kriterienkatalog entwickelt und daraus Untersuchungsregionen abgeleitet. Die Workshops in diesen Regionen sind in Vorbereitung. Modul 3: Die Ergebnisse von AP3 Fallstudie zu Oberflächenanlagen in der Schweiz wurden dem HAFF Team vorgestellt.

TAP SAFE: Fortsetzung der fachlichen Unterstützung der Diskussion um inter- und transdisziplinäre Formate; im Hinblick auf die Diskussion „menschlicher Aktivitäten“ bezüglich Langzeitsicherheit und Safety Case wurde in Abstimmung mit der Projekt- und TAP-Leitung eine Fokussierung auf den Schwerpunkt Managementanforderungen und Lernen vorgenommen, eine interdisziplinäre Publikation ist hierzu in Vorbereitung.

4. Geplante Weiterarbeiten

In den einzelnen Arbeitspaketen sind folgende Tätigkeiten vorgesehen:

TAP HAFF: In Modul 1 werden Pfadbeschreibungen zu den identifizierten Zukunftspfaden (mit Haltepunkten, Pfadänderungen & -gabelungen sowie Reversibilität) erarbeitet. In Modul 2 wird die konzeptionelle Planung und Umsetzung des ersten Td-Formats (Workshops in bereits ausgewählten Untersuchungsregionen) fortgesetzt und im 1. Hj. 2022 umgesetzt. In Modul 3 wird die Fallstudie zu den Oberflächenanlagen in der Schweiz veröffentlicht.

TAP SAFE: In SAFE 2 werden die Vorschläge zu sozialwissenschaftlichen Aspekten weiterentwickelt und entsprechend angepasst eingebunden. Für SAFE 3 sowie übergreifend, werden die sozialwissenschaftlichen Aspekte im Hinblick auf die Aspekte von Lernen in unterschiedlichen sicherheitsrelevanten Kontexten eingeordnet. Eine Publikation ist vorgesehen.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Arbeitsbericht TAP HAFF (Mitarbeit)

Vortrag SAFE ND, Berlin, Nov. 2021; Vortrag DAEF-Workshop „Das Standortauswahlverfahren als Lernendes Verfahren“, 03/2021

Beiträge zur Fachkonferenz Teilgebiete (Feb., Juni, Aug. 2021)

Zuwendungsempfänger: Technische Universität Berlin, Straße des 17. Juni 135, 10623 Berlin		Förderkennzeichen: 02 E 11849H
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt H		
Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit Bereich D2: Sozio-technische Fragestellungen, Feld:2.3		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2019 bis 30.09.2024	Berichtszeitraum: 01.07.2021 bis 31.12.2021	
Gesamtkosten des Vorhabens: 362.577,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. von Hirschhausen	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

In TRANSENS soll transdisziplinär geforscht werden: Die interessierte Öffentlichkeit und andere außerakademische Akteure werden planvoll in Forschungskontexte, konkret in Transdisziplinäre Arbeitspakete (TAP) eingebunden.

Die Möglichkeiten transdisziplinärer Forschung in der nuklearen Entsorgung werden im Verbund systematisch reflektiert (Transdisziplinaritätsforschung). Spezielle Aktivitäten zielen auf Nachwuchsförderung und Kompetenzerhalt.

Dialog und Diskurs sind Schlüssel zur Verständigung. Wie muss der langwierige Prozess gestaltet werden, um dafür gute Bedingungen auf dem Entsorgungspfad zu schaffen? Das ist Gegenstand der transdisziplinären Forschung im TAP DIPRO.

Das Fachgebiet für Wirtschafts- und Infrastrukturpolitik erarbeitet im TAP DIPRO auf der Grundlage disziplinärer und interdisziplinärer Forschung eine Bewertung der volkswirtschaftlichen Vorteilhaftigkeit von Organisationsmodellen bzw. Governance-Strukturen an der Schnittstelle zwischen den Prozessen des Rückbaus, der Lagerung und der Standortsuche. Unter Berücksichtigung ingenieurwissenschaftlicher Erkenntnisse sollen mögliche Synergieeffekte und Hindernisse, die eventuell Verzögerungen oder Kostensteigerungen verursachen könnten, herausgearbeitet werden. Des Weiteren erarbeitet bzw. eruiert das Fachgebiet, basierend auf Wissen über monetäre und nicht-monetäre Anreizstrukturen, in Kooperation mit anderen Partnern verschiedene Kompensationsszenarien und gesellschaftliche Möglichkeiten distributiver Gerechtigkeit im Umgang mit Lasten- und Verantwortungsverteilung.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Das Arbeitsprogramm des TAP Dipro gliedert sich in drei Module, wovon ein Modul der wissenschaftlichen Vorbereitung und ein Modul der Synthese dient. Im Zentrum steht das Praxismodul mit einer Reihe aus drei Workshops für Teilnehmer aus dem nichtakademischen Bereich, in denen jeweils unterschiedliche Aspekte von Gerechtigkeit, Recht und Governance behandelt werden. Bei der Workshop-Organisation wechseln sich die DIPRO-Partner ab. Alle Projektpartner (im TAP DIPRO) sind bei den Workshops vertreten.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- Organisation, Durchführung und Nachbereitung des TRANSENS Arbeitstreffen in Berlin im Hotel H4 vom 06.10.2021 – 08.10.2021
- Konzeptualisierung von Forschungsthema „Wicked Financing“ in Kooperation mit FFU; und Teilnahme Arbeitstreffen zum Thema „Unsicherheiten“
- Vorstellung des Konzeptes: Atomwende als Teil der großen Transformation - Untersuchungen zur Bedeutung der „Atomwende“ im Diskurs eines „guten Standortsuchprozesses“ für ein Endlager in Deutschland, im DIPRO Korridor am 16. Dezember; Erstellung und interne Auseinandersetzung mit Diskussionspapier
- Der Mitarbeiter und TD-Beauftragte Fabian Präger hat am Workshop C in Kiel vom 05.–07. November teilgenommen.
- Erarbeitung und Veröffentlichung von DIW Wochenbericht 47/2021, S. 767-774: „Atomwende: Abschaltung von Kernkraftwerken eröffnet Perspektiven für die Endlagersuche“
- Vorbereitung und Durchführung der TRANSENS Ringvorlesungen „Systemgut Atomkraft - Eine soziotechnische Einführung“ und „Politische Ökonomik der Atomkraft“ für das Wintersemester am 26.10.2021 (Dr. Ben Wealer) und 16.11.2021 (Prof. Dr. Christian von Hirschhausen)
- Der Mitarbeiter Fabian Präger hat sich weiterhin als TD-Beauftragter und Teil der DIPRO Begleitgruppen (DBG) an verschiedenen diversen Onlinetreffen mit der DBG und deren Vorbereitungen beteiligt
- Prof. Dr. Christian von Hirschhausen und der Mitarbeiter Dr. Ben Wealer haben an der BASE-safe-nd Konferenz vom 10.-12.11.2021 teilgenommen
- Der Mitarbeiter Ben Wealer nimmt regelmäßig an Telkos im Rahmen der DIPRO 4er Runde zur Planung und Vorbereitung von Entscheidungen Teil
- Teilnahme an der Teamleiterrunde
- Durchführung des Berlin Seminar on Energy and Climate Policy“ (BSEC): Kernenergie und Energiewende – Bestandsaufnahme und Ausblick Donnerstag, 09. Dezember 2021, 12:30 - 14:00 Uhr (Webinar)

4. Geplante Weiterarbeiten

- Alternativkonzept für den Workshop B (Meilenstein 7) unter Leitung von FU Berlin wird weiterverfolgt und geplant
- Teilnahme am TRANSENS Projekttreffen 2022 an der ETH Zürich, 16.-18. März
- Fertigstellung der Veröffentlichung mit vorläufigem Arbeitstitel: „Atomwende / atompolitische Wende“ - im Diskurs eines „guten Standortsuchprozesses“ für ein Endlager in Deutschland“
- Fortführung des Arbeitsteilprogramms zum Themenkomplex „wicked financing“
- Datensuche zu internationalen Erfahrungen mit Endlagerfinanzierung und -organisationsmodellen

5. Berichte, Veröffentlichungen

DIW Wochenbericht 47/2021, S. 767-774: „Atomwende: Abschaltung von Kernkraftwerken eröffnet Perspektiven für die Endlagersuche“

Zuwendungsempfänger: Technische Universität Carolo-Wilhelmina zu Braunschweig, Universitätsplatz 2, 38106 Braunschweig		Förderkennzeichen: 02 E 11849I
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt I		
Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit Bereich D2: Sozio-technische Fragestellungen, Feld:2.3		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2019 bis 30.09.2024	Berichtszeitraum: 01.07.2021 bis 31.12.2021	
Gesamtkosten des Vorhabens: 1.239.091,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Stahlmann	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Im Verbundvorhaben TRANSENS wird erstmalig in Deutschland transdisziplinäre Forschung zur nuklearen Entsorgung in größerem Maßstab betrieben. Die interessierte Öffentlichkeit und andere außerakademische Akteure werden planvoll in Forschungskontexte, konkret in Transdisziplinäre Arbeitspakete (TAP) eingebunden:

- HAFF: Handlungsfähigkeit und Flexibilität in einem reversiblen Verfahren
- SAFE: Safety Case: Stakeholder-Perspektiven und Transdisziplinarität
- TRUST: Technik, Unsicherheiten, Komplexität und Vertrauen
- DIPRO: Dialoge und Prozessgestaltung in Wechselwirkung von Recht, Gerechtigkeit und Governance

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

In einem Verfahren, das die Rückholung eingelagerter Abfälle im Falle einer ungünstigen Entwicklung des Lagers vorsieht, muss man sich frühzeitig Gedanken machen über Monitoring-Strategien, Entscheidungswege, Entscheidungsträger und Verantwortlichkeiten. Dies ist Gegenstand des TAP TRUST.

Flexibilität statt linearer Ablauf des Verfahrens: schrittweises Vorgehen, Haltepunkte im Verfahrensablauf, die Option von begründeten Rückschritten und die Reaktion auf neue Forschungsergebnisse sind die Themen der transdisziplinären Forschung im TAP HAFF.

Dialog und Diskurs sind Schlüssel zur Verständigung. Wie muss der langwierige Prozess gestaltet werden, um dafür gute Bedingungen auf dem Entsorgungspfad zu schaffen? Das ist Gegenstand der transdisziplinären Forschung im TAP DIPRO.

Das IGG der TU Braunschweig ist in TAP TRUST eingebunden und bearbeitet Fragestellungen zu Monitoring und zur Akzeptabilität von Ungewissheiten während der Beobachtungsphase und einer Rückholung.

Das iBMB der TU Braunschweig ist in den TAPs HAFF und DIPRO eingebunden und entwickelt und visualisiert dazu idealtypische Konzepte für obertägige Anlagen von Endlagern. Dabei wird der komplette Lebenszyklus der Bauwerke betrachtet. Wesentliches Element ist dabei ein lernfähiges Lebenszyklusmanagementsystem.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Am IGG wurden die Arbeiten am Demonstrator „Rückholung“ und an den TAP übergreifenden Thema Ungewissheiten fortgesetzt. Das Thema Ungewissheiten resultierend aus der geologischen und geotechnischen Barriere aus ingenieurwissenschaftlicher Perspektive wurde auf dem Projekttreffen in Braunschweig (19.07.-21.07.2021) vorgestellt und vertieft diskutiert. Es wurde in einen Workshop auf der SafeND-Tagung ein Impulsvortrag gehalten. Der Beitrag zum Thema wurde im Dezember 2021 als Teil des TRANSENS-Arbeitsbericht-04 veröffentlicht.

Zusammen mit der AGBe wurde der Demonstrator „Rückholung“ auf einem virtuellen Workshop am 24.09.2021 diskutiert. Dabei standen vor allem die Anforderungen an eine Rückholung und eine Entscheidung über das Wirtsgestein für die detaillierte Bearbeitung des Forschungsthemas im Vordergrund. Für diese Entscheidung wurden die wichtigen Prozesse bei einer Rückholung in den Wirtsgesteinen Steinsalz und Tonstein vorgestellt und der Kenntnisstand dazu aus geomechanischer Perspektive vorgestellt. Es wurde beschlossen, dass die weiteren Arbeiten am Demonstrator für das Wirtsgestein „Tonstein“ durchgeführt werden.

Im TAP-HAFF hat das iBMB den Jour fix am 03.11.2021 organisiert und sich an den Treffen am 22.9.2021 und 15.12.2021 beteiligt. Hier wurde im Wesentlichen die Erstellung des Arbeitsberichtes und die Weiterarbeit an den TAP-übergreifenden Themen abgestimmt. Der HAFF-Arbeitsbericht wurde finalisiert und TRANSENS-intern veröffentlicht. Zudem wurde mit den Arbeiten an einem weiteren Bericht im TAP HAFF auf Initiative des KIT ITAS mit dem Arbeitstitel „Zukunftspfade Endlager - Entwicklung und Analyse einer Pfadheuristik unter dem Paradigma Handlungsfähigkeit und Flexibilität in einem reversiblen Verfahren“ begonnen. Das iBMB hat die Federführung im Kapitel „Konsolidierte Zwischenlagerung“ übernommen.

Zusammen mit dem Ökoinstitut und der Universität Kassel wurde weiter an dem virtuellen Experiment zur Raumwirkung der Oberflächenanlagen gearbeitet. Am iBMB wurden dazu Varianten von 3D-Modellen für obertägige bauliche Anlagen am Endlagerstandort entwickelt. Am 22.10.2021 gab es ein Arbeitstreffen am Institut für Arbeits- und Organisationspsychologie in Kassel, auf dem das 3D-Modell im virtuellen Labor getestet wurde.

Darüber hinaus haben das IGG und das iBMB am TRANSENS-Arbeitstreffen vom 6. bis zum 8.10.2021 in Berlin teilgenommen.

4. Geplante Weiterarbeiten

Das IGG wird die Ergebnisse der Diskussionen auf dem Workshop mit der AGBe zum Demonstrator „Rückholung“ in die Forschung einfließen lassen. Er wird gerade auf das Wirtsgestein „Tonstein“ adaptiert. Weiterhin sollen Fragestellungen identifiziert werden, bei denen Ungewissheiten und Unbestimmbarkeiten bestehen, die Konsequenzen dieser sollen auf einen weiteren Workshop mit der AGBe erörtert werden. Zuletzt wird ein Format für das Bürgergutachten für 2024 vorbereitet und abgestimmt.

Das iBMB beteiligt sich weiter an der Ausgestaltung der TD-Elemente und entwickelt aufbauend auf den idealtypischen Konzepten für obertägige Anlagen von Tiefenlagern bestehend aus Eingangslager mit Konditionierungsanlage sowie dessen Infrastruktur und der baulichen Transportinfrastruktur unter Tage ein Lebensdauermanagementsystem. Dieses soll auf dem nächsten TRANSENS-Projekttreffen 2022 vorgestellt werden. Das Lebensdauermanagementsystem soll zur Bewertung der Oberflächenanlagen im Hinblick auf Wirtschaftlichkeit, Nachhaltigkeit und Sicherheit eingesetzt werden und so einen Beitrag zur Ausgestaltung der Zukunftspfade Endlager leisten. Darüber hinaus sind weitere studentische Arbeiten zum Thema Dauerhaftigkeit und Lebensdauermanagement geplant.

5. Berichte, Veröffentlichungen

HAFF-Arbeitsbericht: Verzahnungen, Haltepunkte und Wissenskonflikte. Zum Startpunkt und der Verknüpfung der Module und Arbeitspakete im TAP „Handlungsfähigkeit und Flexibilität“, 2021

V. Mintzlaff, J. Stahlmann: Identifikation von Ungewissheiten im Kontext von geologischen und geotechnischen Barrieren. In: T. Hassel, V. Mintzlaff, J. Stahlmann, K.-J. Röhlig, A. Eckhardt Sicherheitsrelevante Barrieren bei der Endlagerung: Ungewissheiten aus der Perspektive der Ingenieurwissenschaften TRANSENS-Bericht-04. ISSN (Online): 2747-4186. DOI: 10.21268/20211129-0

J. Stahlmann, V. Mintzlaff (2021): Ungewissheiten bei geologischen und geotechnischen Barrieren, TRANSENS-Projekttreffen Braunschweig, 19.-21.07.2021

V. Mintzlaff, J. Stahlmann (2021): Uncertainties in regard to the geological and geotechnical Barriers, safeND - Interdisciplinary research symposium on the safety of nuclear disposal practices, Berlin, Westhafen Event & Convention Center – 10.-12. November 2021

Zuwendungsempfänger: Universität Kassel, Mönchebergstr. 19, 34125 Kassel		Förderkennzeichen: 02 E 11849J
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt J		
Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit Bereich D2: Sozio-technische Fragestellungen, Feld:2.2		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2019 bis 30.09.2024	Berichtszeitraum: 01.07.2021 bis 31.12.2021	
Gesamtkosten des Vorhabens: 327.569,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Sträter	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

In TRANSENS soll transdisziplinär geforscht werden: Die interessierte Öffentlichkeit und andere außerakademische Akteure werden planvoll in Forschungskontexte, konkret in vier Transdisziplinäre Arbeitspakete (TAP) eingebunden. Die Möglichkeiten transdisziplinärer Forschung in der nuklearen Entsorgung werden im Verbund systematisch reflektiert; spezielle Aktivitäten zielen auf Nachwuchsförderung und Kompetenzerhalt.

Im TAP HAFF soll Flexibilität statt ein linearer Ablauf des Verfahrens erarbeitet werden durch ein schrittweises Vorgehen, mit Haltepunkten im Verfahrensablauf, der Option von begründeten Rückschritten und Reaktion auf neue Forschungsergebnisse.

Im TAP SAFE wird untersucht, ob und inwieweit Sichtweisen von Nicht-Spezialisten nahelegen, das Konzept des Safety Case anzupassen oder weiterzuentwickeln, um so die Diskurs- und Beratungsfähigkeit zu verbessern. Weiterhin wird untersucht, ob und inwieweit Sichtweisen von Nicht-Spezialisten nahelegen, das Konzept des Safety Case anzupassen oder weiterzuentwickeln, um so die Diskurs- und Beratungsfähigkeit zu verbessern.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Das Fachgebiet Arbeits- und Organisationspsychologie beteiligt sich insbesondere am TAP HAFF und TAP SAFE mit folgenden Arbeitspaketen:

- HAFF AP1: Psychologische Aspekte bei der Entscheidungsfindung für Haltepunkte und Rückschritte.
 - HAFF AP2: Unterstützung des schrittweisen Verfahrens hinsichtlich einer positiven Sicherheits- und Fehlerkultur.
 - HAFF AP3: Anwendung der Methodik auf Szenarien.
- sowie
- SAFE AP1: Bestandsaufnahme ganzheitlicher, systemischer Effekte der menschlichen Zuverlässigkeit auf den Umgang mit Sicherheitsanforderungen.
 - SAFE AP2: Methode zur Berücksichtigung der Aspekte der menschlichen Zuverlässigkeit in den Einschätzungen und Bewertungen von Ungewissheiten.
 - SAFE AP3: Anwendung der Methodik auf Modellrechnungen und Ergebnisdiskussionen.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

HAFF AP1: Der Fragebogen zur Bewertung von Entscheidungsqualität wurde im Rahmen von TRANSENS eingesetzt und wird derzeit methodisch evaluiert.

HAFF AP2: Weiterbearbeitung des Arbeitsberichtes für die Umsetzung einer positiven Sicherheits- und Fehlerkultur (in Zusammenarbeit mit dem Öko-Institut und KIT).

HAFF AP3: Bezüglich einer guten psychologischen Kommunikationskultur wurde die Verbindung des transdisziplinären Ansatzes und der Kommunikationskultur auf dem BASE-Workshop safeND ‚Interdisziplinäres Forschungssymposium für die Sicherheit der nuklearen Entsorgung‘ unter dem Titel ‚Transdisziplinärer Prozess und psychologisch resiliente Kommunikation in der Interaktion der Akteure‘ vorgestellt und zur Diskussion gestellt; der Ansatz wurde durchweg sehr positiv angenommen und erhielt große Resonanz beim Fachpublikum.

SAFE AP1: Die Methoden zur Bewertung der menschlichen Zuverlässigkeit hinsichtlich ganzheitlicher, systemischer Effekte auf den Umgang mit Sicherheitsanforderungen wurden abschließend zusammengestellt.

SAFE AP2: Die Analysen des Einflusses der menschlichen Zuverlässigkeit in den Einschätzungen und Bewertungen von Ungewissheiten auf der Basis der BMU Sicherheitsanforderungen werden zu einem Kapitel des TRANSENS Berichts zu Unsicherheiten zusammengefasst.

SAFE AP3: Mögliche Szenarien zur Demonstration der Bedeutung der Berücksichtigung menschlicher Einflüsse auf die Modellierungsunsicherheit in der geologischen Modellierung als Anwendungsfeld wurden festgelegt und ein Versuchsplan erstellt, um deren Einfluss zu untersuchen (in Zusammenarbeit mit TU Clausthal).

4. Geplante Weiterarbeiten

HAFF AP1: Das entwickelte Fragebogenverfahren wird von TRANSENS auf der DAEF Tagung 2022 vorgestellt und auf ausgewählte Fragestellungen des Projektes angewandt; seine Tauglichkeit hinsichtlich seiner Möglichkeiten zur Einschätzung einer Organisation oder eines Verfahrens hinsichtlich seiner Entscheidungsqualität wird ausgewertet.

HAFF AP2: Weiteres Ausarbeiten des Arbeitsberichts zur Kommunikationskultur für spezifische Anwendungsszenarien im Rahmen der Endlagersuche (beispielsweise: Bürgerbeteiligung, Präsentation von Forschungsergebnissen, Umgang mit Unsicherheiten und Ungewissheiten). Vorstellung der Berichtsthemen auf der TRANSENS-Summer-School in 2022.

HAFF AP3: Weiterführung der methodischen Integration von Kommunikationskultur und TD Ansatz auf Basis der Ergebnisse des BASE Workshop ‚Transdisziplinärer Prozess und psychologisch resiliente Kommunikation in der Interaktion der Akteure‘.

SAFE AP1: Vorbereiten eines Berichtes mit Empfehlungen für die Berücksichtigung der menschlichen Zuverlässigkeit beim Umgang mit den BMU Sicherheitsanforderungen.

SAFE AP2: Demonstration der Aspekte menschlicher Zuverlässigkeit anhand ausgewählter Anforderungen aus der Synopse zu den BMU Sicherheitsanforderungen (als Bestandteil des Berichtes zu AP1).

SAFE AP3: Weiterentwicklung der Methodik zur Bewertung des Einflusses menschlicher Zuverlässigkeit weiteren Endlager-Fragestellungen (nicht allein der geologischen Modellierung).

5. Berichte, Veröffentlichungen

Sträter, O. (2021): Berücksichtigung menschlicher Zuverlässigkeit in der Gestaltung autonomer Systeme. TTZ, VDI, Düsseldorf

Oliver Straeter, O. & Krütli, P. (2021): Transdisciplinary and psychological resilient communication with stakeholders. BASE Workshop safeND, BASE, Berlin

Zuwendungsempfänger: Forschungszentrum Jülich GmbH, Wilhelm-Johnen-Straße, 52428 Jülich		Förderkennzeichen: 02 W 6279
Vorhabensbezeichnung: Neu- und Weiterentwicklung von Konzepten, Methoden und Techniken für die internationale Kernmaterialüberwachung, insbesondere im Rahmen der nuklearen Entsorgung (SAFE-GUARDS-3)		
Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit Bereich D3: Sozio-technische Fragestellungen, Feld: 3.1		
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2019 bis 30.06.2022	Berichtszeitraum: 01.07.2021 bis 31.12.2021	
Gesamtkosten des Vorhabens: 889.554,00 EUR	Projektleiter: Dr. Niemeyer	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Die Bundesregierung soll in ihren Bemühungen unterstützt werden, in Zusammenarbeit mit der IAEO und Euratom das Verifikationssystem zur Nichtweiterverbreitung von Kernwaffen weiterzuentwickeln. Neben der ständigen Verbesserung der Effektivität des Überwachungssystems spielen Gesichtspunkte des Kontrollaufwandes (Effizienz) eine zentrale Rolle. Dieser Aspekt hat besondere Bedeutung bei der erweiterten Aufgabenstellung der IAEO durch das Zusatzprotokoll im Hinblick auf die Entdeckung undeckelter Nuklearmaterialien und Nuklearaktivitäten.

Das Vorhaben baut auf den Ergebnissen der vorangegangenen Vorhaben 02W6184, 02W6218, 02W6232, 02W6243, 02W6259 und 02W6263 auf. Die Arbeiten haben Bezug zum BMWi-Projektförderprogramm „Forschung zur nuklearen Sicherheit 2021-2025“, zu den strategischen Zielen des 7. Energieforschungsprogramm der Bundesregierung (2018) im Rahmen der Entsorgungs- und Endlagerforschung, zum Nationalen Entsorgungsprogramm (2015) sowie zum BMWi-IAEA Joint Programme. Die Arbeiten werden in enger Abstimmung zwischen Regierung, den Kontrollbehörden IAEO und Euratom, Industrie sowie Forschung und Entwicklung geplant und durchgeführt.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP6.1: Konzepte zur Kernmaterialüberwachung
 - AP6.1.1: Safeguards-Konzepte für verlängerte Zwischenlagerzeiten
 - AP6.1.2: Safeguards-Konzepte für unterschiedliche Endlagerkonzepte
 - AP6.1.3 Safeguards-Konzepte für kerntechnische Anlagen im Rückbau
- AP6.2: Methoden und Techniken zur Kernmaterialüberwachung
 - AP6.2.1: Einschluss und Überwachung
 - AP6.2.2: Erneute Behälterüberprüfung (Re-Verifikation)
 - AP6.2.3: Methoden zur Entdeckung von unabhängigen Bergbauaktivitäten und Hohlräumen
 - AP6.2.4: Geoinformationstechnologien
- AP6.3: Kooperation, Kommunikation, Kapazitätsaufbau zur internationalen Kernmaterialüberw.
 - AP6.3.1: Kooperation mit der Deutschen Gesellschaft für Auswärtige Politik (DGAP)
 - AP6.3.2: Pflege des nationalen Safeguards-Internet-Portals
 - AP6.3.3: Nationale Gremien
 - AP6.3.4: Internationale Gremien

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP6.1.1: Erarbeitung der konzeptionellen und technischen Anforderungen an die Safeguardsüberwachung der Zwischenlager in Deutschland bis mindestens 2050
- AP6.1.2: Vorbereitung des Promotionsprojekts zur Safeguardsüberwachung eines HAW Endlagers

- AP6.1.3: Beratung der IAEO zur Entwicklung einer allgemeinen Safeguards-Richtlinie für Anlagen im Rückbau; abschließende Prüfung der Richtlinie
- AP6.2.1: Vorbereitung von Feldtests zur Eignung von 2D- und 3D-Laserscanning im Rahmen von Einschluss und Überwachung der Brennelementbehälter in den Zwischenlagern
- AP6.2.2: Vorbereitung eines Feldtests zur Eignung der Myonen-Tomographie zur Re-Verifikation von Brennelementbehältern in den Zwischenlagern
- AP6.2.3: Beginn eines Promotionsprojekts zur multitemporalen Satellitenbildanalyse im Rahmen der Safeguardsüberwachung von kerntechnischen Anlagen; Vorbereitung eines Fallbeispiels zum Monitoring von HAW Endlagerstandorten
- AP6.3.1: Arbeitsgruppe für Nukleartechnologie und Nonproliferation (AG2N): 4. Sitzung am 28. Okt. 2021 (Distributed Ledger Technology (DLT) Platforms; Machine Learning (ML) and Deep Learning (DL) Techniques) - Vorbereitung, Durchführung, Nachbereitung
- AP6.3.3: Mitarbeit in der Arbeitsgemeinschaft Kernmaterialüberwachung (AKÜ) sowie im Arbeitskreis Spaltstoffüberwachung des VGB PowerTech e.V.
- AP6.3.4: ESARDA: Mitarbeit in Gremien (Steering Committee) und Arbeitsgruppen, Leitung von drei Arbeitsgruppen; INMM: Leitung der 'International Safeguards Division'; INMM/ESARDA: Vorträge und Sitzungsleitung bei der ersten gemeinsamen Jahrestagung (August 2021, online)

4. Geplante Weiterarbeiten

- AP6.1.1: Fortführung der Erarbeitung der konzeptionellen und technischen Anforderungen an die Safeguardsüberwachung der Zwischenlager in Deutschland bis mindestens 2050
- AP6.1.2: Beginn des Promotionsprojekts zur Safeguardsüberwachung eines HAW Endlagers
- AP6.1.3: Fortführung der Beratung der IAEO zur Safeguardsüberwachung von Anlagen im Rückbau, Beratung der Anlagenbetreiber bei der
- AP6.2.1: Durchführung und Auswertung von Feldtests zur Eignung von 2D- und 3D-Laserscanning im Rahmen von Einschluss und Überwachung der Brennelementbehälter in den Zwischenlagern
- AP6.2.2: Durchführung und Auswertung eines Feldtests zur Eignung der Myonen-Tomographie zur Re-Verifikation von Brennelementbehältern in den Zwischenlagern
- AP6.2.3: Fortsetzung des Promotionsprojekts zur multitemporalen Satellitenbildanalyse im Rahmen der Safeguardsüberwachung von kerntechnischen Anlagen; Vorbereitung eines Fallbeispiels zum Monitoring von HAW Endlagerstandorten
- AP6.3.1: Arbeitsgruppe für Nukleartechnologie und Nonproliferation (AG2N): Vorbereitung, Durchführung sowie Nachbereitung der 5. Sitzung (März/April 2022) und 6. Sitzung (Juni 2022)
- AP6.3.3: Mitarbeit in der Arbeitsgemeinschaft Kernmaterialüberwachung (AKÜ) sowie im Arbeitskreis Spaltstoffüberwachung des VGB PowerTech e.V.
- AP6.3.4: ESARDA: Mitarbeit in Gremien (Steering Committee) und Arbeitsgruppen, Leitung von drei Arbeitsgruppen; INMM: Leitung der 'International Safeguards Division'; INMM/ESARDA: Mitarbeit bei der Vorbereitung der zweiten gemeinsamen Jahrestagung 2023, Wien

5. Berichte, Veröffentlichungen

- Tagungsband der gemeinsamen INMM/ESARDA Jahrestagung, online, 23. Aug. bis 1. Sept. 2021:
- L. Joyce, L. Annadevula, S. K. Aghara, Th. Krieger, K. Jarman: Stochastic Model Simulation for Evaluation Of Spent Fuel Pond Inventory Verification Sampling Plans
 - L. Beumer, I. Niemeyer: Data Science meets Nuclear – What Data Analytics, Computational Intelligence and Maschine Learning can contribute to Nuclear Waste Management and Nuclear Verification
 - V. Sequeira, E. Wolfart, G. Boström, J. Pekkarinen, M. Murtezi, S. Rocchi, M. John, S. Dietz, B. Wishard, M. Moeslinger, K. Aymanns: Laser Curtain for Containment and Tracking
 - M. Weekes, L. Thompson, P. Stockwell, C. Vieh, I. Niemeyer, K. Aymanns: Design Information Verification of a Geological Repository for High Level Waste using Muon Tomography
 - P. Checchia, D. Ancius, P. Andreoto, K. Aymanns, M. Benettoni, G. Bonomi, P. Calvini, L. Casetllani, E. Conti, F. Gonella, A. Jussofie, A. Lorenzon, F. Montecassiano, M. Murtezi, K. Schoop, M. Turcato, G. Zumerle: Muon tomography for dual cask purpose (MUTOMCA) Project
 - S. Neumeier, P. Kegler, M. Klinkenberg, S.K. Potts, D. Bosbach, I. Niemeyer: Uranium oxide based micro-particulate reference materials for analytical measurements in nuclear safeguards – Status & perspective

Information zu Publikationen sowie zu Aus- und Weiterbildung

In den Halbjahresberichten werden in kurzgefasster Form die Ergebnisse der aktuell bewilligten Forschungsvorhaben dargestellt. Vorhabenrelevante Publikationen werden aufgelistet, soweit es der Platz zulässt; es ist aber nicht immer möglich, alle im Rahmen eines FuE-Vorhabens erfolgten Veröffentlichungen (schriftlich oder mündlich) aufzunehmen. Ferner sind Informationen zur Aus- und Weiterbildung wissenschaftlichen Nachwuchses bei den Forschungseinrichtungen nicht explizit abgefragt und ausgewiesen worden.

Es wurde daher beginnend mit dem Jahr 2015 vereinbart, zukünftig Angaben zur Gesamtzahl der Publikationen und zu Ausbildungsaspekten zu machen. Die entsprechenden Daten werden von den Forschungseinrichtungen zur Verfügung gestellt.

Die zusammenfassende Darstellung erfolgt im jeweils zweiten Halbjahresbericht eines Kalenderjahres. Damit soll zusätzlich zur Kurzdarstellung der Vorhabenergebnisse in den Fortschrittsberichten dokumentiert werden, dass und wie die FuE-Ergebnisse verbreitet werden.

Publikationen

Im Jahr 2021 erfolgten in rund 87 Veröffentlichungen in begutachteten Journalen, in Form von Schlussberichten, Doktor-, Master-, Bachelor- und Studienarbeiten oder in sonstiger schriftlicher Form die Publikation von Ergebnissen von FuE-Vorhaben durch die geförderten Forschungseinrichtungen.

Zudem wurden im Jahr 2021 rund 98 Vorträge auf Konferenzen, bei Workshops und sonstigen Veranstaltungen gehalten und Ergebnisse bzw. Zwischenergebnisse präsentiert.

Aus- und Weiterbildung

Ein strategisches Forschungsziel der BMWi-Förderung ist die Bereitstellung von Expertise und Wissen, der Erhalt und Ausbau wissenschaftlich-technischer Kompetenz und als wichtiges Element dafür 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 und Finanzierung wissenschaftlichen Nachwuchses im Rahmen einer wissenschaftlichen Kooperation zwischen Universitäten und Unternehmen.

Im Jahr 2021 waren in den hier aufgeführten FuE-Vorhaben 87 Nachwuchswissenschaftler in FuE-Vorhaben eingebunden.

3 Verzeichnis der Forschungsstellen

Bundesanstalt für Materialforschung und –prüfung (BAM), Unter den Linden 87, 12205 Berlin
--

- | | | |
|------------|--|----|
| 02 E 11779 | MgO-Spritzbeton für Streckenverschlüsse für HAW-Endlager im Steinsalz, Qualitätssicherung mit Ultraschall (MgO-S3) | 82 |
|------------|--|----|

BGE TECHNOLOGY GmbH, Eschenstraße 55, 31224 Peine
--

- | | | |
|-------------|---|-----|
| 02 E 11577A | Verbundprojekt: Sicherheitsanalytische Untersuchungen zu Endlager-systemen im Kristallin (SUSE), Teilprojekt A | 30 |
| 02 E 11617A | Verbundprojekt: Entwicklung eines Sicherheits- und Nachweiskonzeptes für ein Endlager für Wärme entwickelnde radioaktive Abfälle im Kristallingestein in Deutschland (CHRISTA II), Teilprojekt A | 42 |
| 02 E 11658B | Verbundprojekt: Aktualisierung der Sicherheits- und Nachweismethodik für die HAW-Endlagerung im Tongestein in Deutschland (ANSICHT II), Teilprojekt B | 56 |
| 02 E 11839 | Entwicklung eines Leitfadens zur Auslegung und zum Nachweis von geotechnischen Barrieren für ein HAW Endlager in Salzformationen (RANGERS) | 98 |
| 02 E 11890A | Verbundprojekt: Entwicklung und Test eines erweiterten Hoek-Brown Stoffmodells zur Berücksichtigung anisotropen Festigkeitsverhaltens bei der Anwendung der Integritätskriterien für kristalline Wirtsgesteine (BARIK), Teilprojekt A | 142 |
| 02 E 11900 | Langzeitsicherheit von Verschlussystemen in Schächten und Rampen im Vergleich (LARYSSA) | 146 |
| 02 E 11951B | Verbundprojekt: Kompaktion von Salzgrus für den sicheren Einschluss - Phase 2 (KOMPASS II), Teilprojekt B | 162 |
| 02 E 11971B | Verbundprojekt: Anwendbarkeit von Niedertemperatur-Salzschnmelzen für Verschlussmaßnahmen von Endlagern für radioaktiver Abfälle im Wirtsgestein Salz (SalVE), Teilprojekt B | 172 |

Christian-Albrechts-Universität zu Kiel, Christian-Albrecht-Platz 4, 24118 Kiel
--

- | | | |
|-------------|--|-----|
| 02 E 11849B | Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt B | 192 |
|-------------|--|-----|

Dr. Andreas Hampel, Grünberger Str. 56, 55129 Mainz
--

- | | | |
|-------------|--|----|
| 02 E 11446A | Verbundprojekt: Weiterentwicklung und Qualifizierung der gebirgsmechanischen Modellierung für die HAW-Endlagerung im Steinsalz (WEIMOS), Teilprojekt A | 18 |
|-------------|--|----|

Forschungszentrum Jülich GmbH, Wilhelm-Johnen-Straße, 52428 Jülich

- | | | |
|-------------|--|-------|
| 02 E 11607D | Verbundprojekt: Verhalten langlebiger Spalt- und Aktivierungsprodukte im Nahfeld von Endlagern unterschiedlicher Wirtsgesteine und Möglichkeiten ihrer Rückhaltung (VESPA II), Teilprojekt D | 📖 40 |
| 02 E 11921A | Verbundprojekt: Untersuchungen zur SEParation von AMericium aus hochradioaktiven Abfalllösungen (SEPAM), Teilprojekt A | 📖 152 |
| 02 W 6279 | Neu- und Weiterentwicklung von Konzepten, Methoden und Techniken für die internationale Kernmaterialüberwachung, insbesondere im Rahmen der nuklearen Entsorgung (SAFEGUARDS-3) | 📖 210 |

Freie Universität Berlin, Kaiserwerther Str. 16-18, 14195 Berlin

- | | | |
|-------------|--|-------|
| 02 E 11849C | Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt C | 📖 194 |
|-------------|--|-------|

Friedrich-Schiller-Universität Jena, Fürstengraben 1, 07743 Jena

- | | | |
|-------------|---|-------|
| 02 E 11759A | Verbundprojekt: Grimsel Felslabor: In-situ-Experimente zur Bentonit Langzeit-Stabilität und der Radionuklidmobilität an der Grenzfläche Bentonit - Kristallin (KOLLORADO-e3), Teilprojekt A | 📖 72 |
| 02 E 11850E | Verbundprojekt: Deutsch-chinesische Entsorgungsforschung – Pilotprojekt: Reanalysis of BRIUG THM Mock-up Test (ELF-China-Pilot), Teilprojekt E | 📖 108 |
| 02 E 11911B | Verbundprojekt: Vorhersage der heterogenen Radionuklidsorption auf Kluft- und Störungsflächen in granitischen Gesteinen: Parametrisierung und Validierung verbesserter reaktiver Transportmodelle (WTZ-Granit), Teilprojekt B | 📖 150 |

Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Schwertnergasse 1, 50667 Köln

- | | | |
|-------------|--|------|
| 02 E 11466 | Entwicklung von Rechenmodulen für die integrierte Modellierung von Transportprozessen im einschlusswirksamen Gebirgsbereich (RepoTREND+) | 📖 28 |
| 02 E 11577B | Verbundprojekt: Sicherheitsanalytische Untersuchungen zu Endlagersystemen im Kristallin (SUSE), Teilprojekt B | 📖 32 |
| 02 E 11607A | Verbundprojekt: Verhalten langlebiger Spalt- und Aktivierungsprodukte im Nahfeld von Endlagern unterschiedlicher Wirtsgesteine und Möglichkeiten ihrer Rückhaltung (VESPA II), Teilprojekt A | 📖 34 |
| 02 E 11617B | Verbundprojekt: Entwicklung eines Sicherheits- und Nachweiskonzeptes für ein Endlager für Wärme entwickelnde radioaktive Abfälle im Kristallingestein in Deutschland (CHRISTA II), Teilprojekt B | 📖 44 |
| 02 E 11627 | Arteigene Versatz- und Verschlussmaterialien für die Endlagerung hochradioaktiver Abfälle in Tonformationen (AVET) | 📖 46 |
| 02 E 11658A | Verbundprojekt: Aktualisierung der Sicherheits- und Nachweismethodik für die HAW-Endlagerung im Tongestein in Deutschland (ANSICHT II), Teilprojekt A | 📖 54 |
| 02 E 11668A | Verbundprojekt: Smart-K _d in der Langzeitsicherheitsanalyse - Anwendungen (SMILE), Teilprojekt A | 📖 58 |

- 02 E 11698 Untersuchung thermisch-hydraulisch-mechanisch-chemischer Einwirkungen auf zementbasierte Dichtelemente (THYMECZ) 📖 66
- 02 E 11759C Verbundprojekt: Grimsel Felslabor: In-situ-Experimente zur Bentonit Langzeit-Stabilität und der Radionuklidmobilität an der Grenzfläche Bentonit - Kristallin (KOLLORADO-e3), Teilprojekt C 📖 76
- 02 E 11799B Verbundprojekt: Vertikales hydraulisches Dichtsystem nach dem Sandwich-Prinzip - Hauptprojekt (SANDWICH-HP), Teilprojekt B 📖 86
- 02 E 11809A Verbundprojekt: Weiterentwicklung von d³f⁺⁺: Hydrogeologische Modellierung im regionalen Maßstab (HYMNE), Teilprojekt A 📖 90
- 02 E 11819 Mineralumwandlung und Sorption bei erhöhten Temperaturen in geklüfteten Kristallingesteinen und Barrierematerial (MUSE) 📖 94
- 02 E 11829 Tonsteinforschung im Felslabor Mont Terri ab Phase 25 (MonTe-25) 📖 96
- 02 E 11850B Verbundprojekt: Deutsch-chinesische Entsorgungsforschung – Pilotprojekt: Reanalysis of BRIUG THM Mock-up Test (ELF-China-Pilot), Teilprojekt B 📖 102
- 02 E 11870A Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt A 📖 128
- 02 E 11880 Sicherheitsrelevante Untersuchungen zur Bentonitaufsättigung (SIRUB) 📖 140
- 02 E 11941 Wissenschaftliche Grundlagen zum Nachweis der Langzeitsicherheit von Endlagern (WiGru-9) 📖 158
- 02 E 11951A Verbundprojekt: Kompaktion von Salzgrus für den sicheren Einschluss - Phase 2 (KOMPASS II), Teilprojekt A 📖 160
- 02 E 11981A Verbundprojekt: Implementierung eines Monitoringsystems zur Evaluierung der Korrosionsvorgänge an Behältermaterialien in Bentonitbasierten Endlagerkonzepten (IMKORB), Teilprojekt A 📖 174

Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e.V., Bautzner Landstraße 400, 01328 Dresden

- 02 E 11607B Verbundprojekt: Verhalten langlebiger Spalt- und Aktivierungsprodukte im Nahfeld von Endlagern unterschiedlicher Wirtsgesteine und Möglichkeiten ihrer Rückhaltung (VESPA II), Teilprojekt B 📖 36
- 02 E 11668B Verbundprojekt: Smart-K_d in der Langzeitsicherheitsanalyse - Anwendungen (SMILE), Teilprojekt B 📖 60
- 02 E 11748B Verbundprojekt: Strömungstechnischer Funktionsnachweis für Verschlussbauwerke und flüssigkeitsgestützte Abdichtung des Kontaktbereiches - Phase III: Vertiefung Kenntnisstand Kontaktbereich & Injektionsmittel, In-situ-Versuche (STROEFUN III), Teilprojekt B 📖 70
- 02 E 11769B Verbundprojekt: MgO-Spritzbeton für Streckenverschlüsse für HAW-Endlager im Steinsalz (MgO-S3), Teilprojekt B 📖 80
- 02 E 11860B Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt B 📖 114

02 E 11870B Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt B 📖 130

02 E 11911A Verbundprojekt: Vorhersage der heterogenen Radionuklidsorption auf Kluft- und Störungsflächen in granitischen Gesteinen: Parametrisierung und Validierung verbesserter reaktiver Transportmodelle (WTZ-Granit), Teilprojekt A 📖 148

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

02 E 11850A Verbundprojekt: Deutsch-chinesische Entsorgungsforschung – Pilotprojekt: Reanalysis of BRIUG THM Mock-up Test (ELF-China-Pilot), Teilprojekt A 📖 100

Helmholtz-Zentrum Potsdam Deutsches GeoForschungsZentrum GFZ, Telegrafenberg, 14473 Potsdam

02 E 11637B Verbundprojekt: Geomechanisch-numerische Modellierungen zur Charakterisierung des tektonischen Spannungszustandes für die Entsorgung radioaktiver Abfälle in Deutschland (SpannEnD), Teilprojekt B: Multiskalenansatz 📖 50

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

02 E 11446B Verbundprojekt: Weiterentwicklung und Qualifizierung der gebirgsmechanischen Modellierung für die HAW-Endlagerung im Steinsalz (WEIMOS), Teilprojekt B 📖 20

02 E 11951C Verbundprojekt: Kompaktion von Salzgrus für den sicheren Einschluss - Phase 2 (KOMPASS II), Teilprojekt C 📖 164

Johannes Gutenberg-Universität Mainz, Saarstraße 21, 55122 Mainz

02 E 11860A Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt A 📖 112

Johann Wolfgang Goethe-Universität Frankfurt am Main, Senckenberganlage 31, 60325 Frankfurt am Main

02 E 11809B Verbundprojekt: Weiterentwicklung von d³f⁺⁺: Hydrogeologische Modellierung im regionalen Maßstab (HYMNE), Teilprojekt B 📖 92

Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Kaiserstr. 12, 76131 Karlsruhe

02 E 11637C Verbundprojekt: Geomechanisch-numerische Modellierungen zur Charakterisierung des tektonischen Spannungszustandes für die Entsorgung radioaktiver Abfälle in Deutschland (SpannEnD), Teilprojekt C: Geomechanik von Sedimentbecken 📖 52

02 E 11799A Verbundprojekt: Vertikales hydraulisches Dichtsystem nach dem Sandwich-Prinzip - Hauptprojekt (SANDWICH-HP), Teilprojekt A 📖 84

02 E 12001A Verbundprojekt: Sandwich Support Projekt 1: Heterogene Bentonithydratation (SANDWICH-SP1), Teilprojekt A 📖 182

Leibniz Universität Hannover, Welfengarten 1, 30167 Hannover

- | | | |
|-------------|--|-----|
| 02 E 11446C | Verbundprojekt: Weiterentwicklung und Qualifizierung der gebirgsmechanischen Modellierung für die HAW-Endlagerung im Steinsalz (WEIMOS), Teilprojekt C | 22 |
| 02 E 11849F | Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt F | 200 |
| 02 E 11870E | Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt E | 136 |
| 02 E 11870F | Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt F | 138 |
| 02 E 11981C | Verbundprojekt: Implementierung eines Monitoringsystems zur Evaluierung der Korrosionsvorgänge an Behältermaterialien in Bentonitbasierten Endlagerkonzepten (IMKORB), Teilprojekt C | 178 |

Öko-Institut. Institut für angewandte Ökologie e. V., Merzhauser Str. 173, 79100 Freiburg
--

- | | | |
|-------------|--|-----|
| 02 E 11789 | Wegemanagement bei der Entsorgung hoch radioaktiver Abfälle in Deutschland (WERA) | 188 |
| 02 E 11849G | Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt G | 202 |

Rheinisch-Westfälische Technische Hochschule Aachen, Templergraben55, 52062 Aachen





- | | | |
|------------|--|-----|
| 02 E 11931 | Einfluss der thermischen Reife auf die gekoppelten hydro-mechanischen Eigenschaften niedrig-durchlässiger Tonsteine – Feld & Laborskala (Maturity) | 156 |
|------------|--|-----|

Ruhr-Universität Bochum, Universitätsstr. 150, 44801 Bochum
--







- | | | |
|-------------|--|-----|
| 02 E 12001B | Verbundprojekt: Sandwich Support Projekt 1: Heterogene Bentonithydratation (SANDWICH-SP1), Teilprojekt B | 184 |
|-------------|--|-----|

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


- | | | |
|-------------|--|-----|
| 02 E 11607C | Verbundprojekt: Verhalten langlebiger Spalt- und Aktivierungsprodukte im Nahfeld von Endlagern unterschiedlicher Wirtsgesteine und Möglichkeiten ihrer Rückhaltung (VESPA II), Teilprojekt C | 38 |
| 02 E 11668C | Verbundprojekt: Smart-K _d in der Langzeitsicherheitsanalyse - Anwendungen (SMILE), Teilprojekt C | 62 |
| 02 E 11759B | Verbundprojekt: Grimsel Felslabor: In-situ-Experimente zur Bentonit Langzeit-Stabilität und der Radionuklidmobilität an der Grenzfläche Bentonit - Kristallin (KOLLORADO-e3), Teilprojekt B | 74 |
| 02 E 11849D | Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt D | 196 |
| 02 E 11849E | Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt E | 198 |

- 02 E 11860C Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt C  116
- 02 E 11850F Verbundprojekt: Deutsch-chinesische Entsorgungsforschung – Pilotprojekt: Reanalysis of BRIUG THM Mock-up Test (ELF-China-Pilot), Teilprojekt F  110
- 02 E 11921B Verbundprojekt: Untersuchungen zur SEParation von AMericium aus hochradioaktiven Abfalllösungen (SEPAM), Teilprojekt B  154
- 02 E 11981B Verbundprojekt: Implementierung eines Monitoringsystems zur Evaluierung der Korrosionsvorgänge an Behältermaterialien in Bentonit-basierten Endlagerkonzepten (IMKORB), Teilprojekt B  176



Technische Universität Bergakademie Freiberg, Akademiestraße 6, 09599 Freiberg

- 02 E 11769A Verbundprojekt: MgO-Spritzbeton für Streckenverschlüsse für HAW-Endlager im Steinsalz (MgO-S3), Teilprojekt A  78
- 02 E 11799C Verbundprojekt: Vertikales hydraulisches Dichtsystem nach dem Sandwich-Prinzip - Hauptprojekt (SANDWICH-HP), Teilprojekt C  88
- 02 E 11850C Verbundprojekt: Deutsch-chinesische Entsorgungsforschung – Pilotprojekt: Reanalysis of BRIUG THM Mock-up Test (ELF-China-Pilot), Teilprojekt C  104
- 02 E 11890B Verbundprojekt: Entwicklung und Test eines erweiterten Hoek-Brown Stoffmodells zur Berücksichtigung anisotropen Festigkeitsverhaltens bei der Anwendung der Integritätskriterien für kristalline Wirtsgesteine (BARIK), Teilprojekt B  144
- 02 E 11961 Entwicklung eines salzgrusbasierten Versatzkonzepts unter der Option Rückholbarkeit - Phase 1 (SAVER)  168
- 02 E 11971A Verbundprojekt: Anwendbarkeit von Niedertemperatur-Salzschmelzen für Verschlussmaßnahmen von Endlagern für radioaktiver Abfälle im Wirtsgestein Salz (SalVE), Teilprojekt A  170

Technische Universität Berlin, Straße des 17. Juni 135, 10623 Berlin

- 02 E 11849H Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt H  204

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  24
- 02 E 11849I Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt I  206

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

- | | | |
|-------------|---|-----|
| 02 E 11446E | Verbundprojekt: Weiterentwicklung und Qualifizierung der gebirgsmechanischen Modellierung für die HAW-Endlagerung im Steinsalz (WEIMOS), Teilprojekt E | 26 |
| 02 E 11688 | Langzeitsicheres Abdichtungselement aus Salzschnittblöcken - Durchführung, Auswertung und Reanalyse von THM-Versuchen (Salzschnittblöcke III) | 64 |
| 02 E 11748A | Verbundprojekt: Strömungstechnischer Funktionsnachweis für Verschlussbauwerke und flüssigkeitsgestützte Abdichtung des Kontaktbereiches - Phase III: Vertiefung Kenntnisstand Kontaktbereich & Injektionsmittel, In-situ-Versuche (STROEFUN III), Teilprojekt A | 68 |
| 02 E 11849A | Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt A | 190 |
| 02 E 11850D | Verbundprojekt: Deutsch-chinesische Entsorgungsforschung – Pilotprojekt: Reanalysis of BRIUG THM Mock-up Test (ELF-China-Pilot), Teilprojekt D | 106 |
| 02 E 11951D | Verbundprojekt: Kompaktion von Salzgrus für den sicheren Einschluss - Phase 2 (KOMPASS II), Teilprojekt D | 166 |
| 02 E 11991 | Entwicklung und Validation einer neuartigen Versuchstechnik für triaxiale Kriechversuche bei geringer deviatorischer Belastung (KRIECHTECH) | 180 |

Technische Universität Darmstadt, Karolinenplatz 5, 64289 Darmstadt
--

- | | | |
|-------------|--|----|
| 02 E 11637A | Verbundprojekt: Geomechanisch-numerische Modellierungen zur Charakterisierung des tektonischen Spannungszustandes für die Entsorgung radioaktiver Abfälle in Deutschland (SpannEnD), Teilprojekt A: 3D-Spannungsmodell und Aufskalierung | 48 |
|-------------|--|----|

Technische Universität Dresden, Helmholtzstr. 10, 01069 Dresden
--

- | | | |
|-------------|--|-----|
| 02 E 11860G | Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt G | 124 |
|-------------|--|-----|


Technische Universität München, Arcisstraße 21, 80333 München
--

- | | | |
|-------------|--|-----|
| 02 E 11860E | Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt E | 120 |
| 02 E 11870D | Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt D | 134 |


Universität des Saarlandes, Campus, 66123 Saarland

- | | | |
|-------------|--|-----|
| 02 E 11860D | Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt D | 118 |
|-------------|--|-----|


Universität Greifswald, Domstr. 11, 17489 Greifswald

- 02 E 11870C Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt C  132

Universität Heidelberg, Grabengasse 1, 69117 Heidelberg

- 02 E 11860H Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt H  126

Universität Kassel, Mönchebergstr. 19, 34125 Kassel

- 02 E 11849J Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt J  208

Universität Potsdam, Am Neuen Palais 10, 14469 Potsdam

- 02 E 11860F Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt F  122