

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

**PTE Nr. 46**

BMWf geförderte FuE zu  
„Endlagerung radioaktiver Abfälle“

Berichtszeitraum: 1. Juli - 31. Dezember 2013

Projektträger Karlsruhe  
Wassertechnologie und Entsorgung  
(PTKA-WTE)

**Februar 2014**

## PTE-Berichte

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

Die Fortschrittsberichtsreihen behandeln folgende Themenschwerpunkte:

- 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/wte/287.php](http://www.ptka.kit.edu/wte/287.php)

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

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

## Vorwort

Das KIT betreut seit 1991 im Auftrag des Bundesministeriums für Bildung und Forschung (BMBF) und des Bundesministeriums für Wirtschaft und Technologie (BMWi) als Projektträger FuE-Vorhaben auf dem Gebiet „Entsorgung“. Die FuE-Schwerpunkte sind in den Förderkonzepten „Forschungsförderung zur Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen“ und „Schwerpunkte zukünftiger FuE-Arbeiten bei der Endlagerung radioaktiver Abfälle“ sowie deren Fortschreibungen aufgeführt. Seit dem Ende der BMBF-geförderten FuE zur untertägigen Entsorgung chemotoxischer Abfälle im Jahr 2011 ist die Betreuung der FuE zur Endlagerung radioaktiver Abfälle der Tätigkeitsschwerpunkt.

Im Rahmen dieses Auftrages betreut der Projektträger Karlsruhe fachlich und administrativ die vom BMWi im Rahmen des Förderkonzepts geförderten FuE-Vorhaben zu den aufgeführten Themenbereichen:

Endlagerung radioaktiver Abfälle

BMWi Referat III C7

- Endlagersystem
- Systemverhalten und Systembeschreibung
- Querschnittsthemen mit Bezug zur Endlagerung
- Kernmaterialüberwachung

(Die im Auftrag des BMBF betreuten FuE-Vorhaben zu den FuE-Schwerpunkten:

BMBF Referat 724

- Untertägige Entsorgung chemotoxischer Abfälle
  - Sicherheitsforschung für Bergbauregionen
- wurden zum 31.12.2011 beendet.)

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

Dem Bericht liegt folgendes Gliederungsprinzip zugrunde:

Im Teil 1 sind die FuE-Vorhaben dem jeweiligen Themenbereich zugeordnet.

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

- E ⇒ „Endlagerung radioaktiver Abfälle“
- W ⇒ „Kernmaterialüberwachung“
- KWA ⇒ „Hausvorhaben“ des BMWi

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



## Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Verzeichnis der Fördervorhaben gemäß FuE-Themenbereichen .....</b>	<b>1</b>
1.1	<i>Endlagersystem .....</i>	<i>1</i>
1.2	<i>Systemverhalten und Systembeschreibung .....</i>	<i>3</i>
1.3	<i>Querschnittsthemen mit Bezug zur Endlagerung .....</i>	<i>9</i>
1.4	<i>Kernmaterialüberwachung.....</i>	<i>11</i>
<b>2</b>	<b>Formalisierte Zwischenberichte .....</b>	<b>13</b>
2.1	E-VORHABEN .....	13
2.2	W-VORHABEN.....	155
2.3	BMWl-HAUSVORHABEN.....	159
<b>3</b>	<b>Verzeichnis der ausführenden Forschungsstellen.....</b>	<b>163</b>



# 1 Verzeichnis der Fördervorhaben gemäß FuE-Themenbereichen

## 1.1 Endlagersystem

<b>02 E 10086</b>	Untersuchungen zur Auswirkung einer Temperaturerhöhung in Tonformationen in Deutschland im Hinblick auf die bautechnische Machbarkeit eines Endlagers und irreversible Veränderungen der potenziellen Wirtsfornation -TemTon-	<b>DBE Technology GmbH, Peine</b>	📖 16
<b>02 E 10689</b>	Long-Term Performance of Engineered Barrier Systems, Kurztitel: PEBS	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln</b>	📖 26
<b>02 E 10719</b>	Komplettierung des Instrumentariums zur Technischen Realisierbarkeit und sicherheitlichen Bewertung von HAW-Endlagern im Salinar (KOMTESSA)	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln</b>	📖 28
<b>02 E 10729</b>	Komplettierung des Instrumentariums zur Technischen Realisierbarkeit und sicherheitlichen Bewertung von HAW-Endlagern im Salinar (KOMTESSA)	<b>DBE Technology GmbH, Peine</b>	📖 30
<b>02 E 10750</b>	Verbundprojekt: Untersuchungen zur Robustheit der Sicherheitsaussage zu HAW-Endlagersystemen in magmatischen Wirtsgestein – Kurztitel: URSEL	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln</b>	📖 36
<b>02 E 10760</b>	Verbundprojekt: Untersuchungen zur Robustheit der Sicherheitsaussage zu HAW-Endlagersystemen in magmatischen Wirtsgestein – Kurztitel: URSEL	<b>DBE Technology GmbH, Peine</b>	📖 38
<b>02 E 10880</b>	Zusammenhang von Chemismus und mechanische Eigenschaften des MgO-Baustoffs	<b>Technische Universität Bergakademie Freiberg</b>	📖 60
<b>02 E 11092</b>	Gefügestabilisierter Salzgrusversatz (GESAV) – Phase 1	<b>Technische Universität Bergakademie Freiberg</b>	📖 110
<b>02 E 11112</b>	Auswirkungen der Sicherheitsanforderungen Rückholbarkeit auf existierende Einlagerungskonzepte und Anforderungen an neue Konzepte (ASTERIX)	<b>DBE Technology GmbH, Peine</b>	📖 114
<b>02 E 11132</b>	Langzeitsicherer Schachtverschluss im Salinar – Kurztitel: LASA	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln</b>	📖 118
<b>02 E 11142</b>	Performance Assessment of Sealing Systems - Kurztitel: PASS	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln</b>	📖 120
<b>02 E 11152</b>	Prozess-Simulation zur Konzeption von Stütz- und Dichtelementen für Schachtverschlüsse (ProSiD)	<b>DBE Technology GmbH, Peine</b>	📖 122

<b>02 E 11193A</b>	Schachtverschlüsse für Endlager für hochradioaktive Abfälle (ELSA – Phase II): Konzeptentwicklung für Schachtverschlüsse und Test von Funktionselementen von Schachtverschlüssen	<b>Technische Universität Bergakademie Freiberg</b>	132
<b>02 E 11193B</b>	Schachtverschlüsse für Endlager für hochradioaktive Abfälle (ELSA – Phase II): Konzeptentwicklung für Schachtverschlüsse und Test von Funktionselementen von Schachtverschlüssen	<b>DBE Technology GmbH, Peine</b>	134
<b>02 E 11233</b>	Status Quo der Lagerung C-14-haltiger Abfälle aus deutschen Hochtemperatur- und Forschungsreaktoren und Strategie (Lösungsansatz) zu deren künftigen Endlagerung (CarbonForeSt)	<b>DBE Technology GmbH, Peine</b>	144
<b>02 E 11263</b>	Sicherheitstechnische Untersuchungen zum Schachttransport schwerer Lasten bis zu 175 Tonnen Nutzlast (SULa)	<b>DBE Technology GmbH, Peine</b>	150
<b>02 E 11243</b>	Langzeitsicherer Schachtverschluss im Salinar – Ergänzende laborative und modelltheoretische Untersuchungen zum HM-gekoppelten Rekompaktionsverhalten der EDZ (LASA-EDZ)	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln</b>	146
<b>02 E 11253</b>	Strömungstechnischer Funktionsnachweis für Verschlussbauwerke im Steinsalz und deren flüssigkeitsgestützte Abdichtung – Phase I (Konzeption von Funktionsnachweis und Abdichtungsmethoden, Testung und Auswahl von Behandlungsfluiden)	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln</b>	148
<b>KWA 9005</b>	Unterstützungsprogramm Alternative Wirtsgesteine	<b>Projektträger Karlsruhe, Wassertechnologie und Entsorgung (PTKA-WTE)</b>	160





## 1.2 Systemverhalten und Systembeschreibung

<b>02 E 9944</b>	Geoelektrische Untersuchung der Aufsättigung von Bentonitbarrieren im HRL-Äspö-Projekt „Prototype Repository“ – Phase 2	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln</b>	📖 14
<b>02 E 10367</b>	Anpassung des EMOS-Programmsystems an moderne Softwareanforderungen	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln</b>	📖 18
<b>02 E 10377</b>	Untersuchung der THM-Prozesse im Nahfeld von Endlagern in Tonformationen	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln</b>	📖 20
<b>02 E 10608</b>	Werkzeuge und Daten für die Geochemische Modellierung, Kurztitel: WeDa	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln</b>	📖 22
<b>02 E 10639</b>	Untersuchung zu Rahmenbedingungen und Aufbau eines Endlager-Monitoring für hochradioaktive Abfälle in verschiedenen Wirtformationen und Phasen einer Endlagerentwicklung unter Berücksichtigung von Machbarkeit und Unsicherheiten (MonA)	<b>DBE Technology GmbH, Peine</b>	📖 24
<b>02 E 10730</b>	Restporosität und -permeabilität von kompaktierendem Salzgrus-Versatz in einem HAW-Endlager	<b>DBE Technology GmbH, Peine</b>	📖 32
<b>02 E 10740</b>	Restporosität und -permeabilität von kompaktierendem Salzgrus-Versatz in einem HAW-Endlager	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln</b>	📖 34
<b>02 E 10770</b>	Verbundprojekt: Verhalten langlebiger Spalt- und Aktivierungsprodukte im Nahfeld eines Endlagers und Möglichkeiten ihrer Rückholung (VESPA)	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln</b>	📖 40
<b>02 E 10780</b>	Verbundprojekt: Verhalten langlebiger Spalt- und Aktivierungsprodukte im Nahfeld eines Endlagers und Möglichkeiten ihrer Rückholung (VESPA)	<b>Forschungszentrum Jülich GmbH</b>	📖 42
<b>02 E 10790X</b>	Verbundprojekt: Verhalten langlebiger Spalt- und Aktivierungsprodukte im Nahfeld eines Endlagers und Möglichkeiten ihrer Rückholung (VESPA)	<b>Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e. V., Dresden</b>	📖 44
<b>02 E 10800</b>	Verbundprojekt: Verhalten langlebiger Spalt- und Aktivierungsprodukte im Nahfeld eines Endlagers und Möglichkeiten ihrer Rückholung (VESPA)	<b>Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Eggenstein-Leopoldshafen</b>	📖 46

<b>02 E 10810</b>	Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von Modellberechnungen zum thermo-mechanischen Verhalten und zur Verheilung von Steinsalz (TV1: Dr. Andreas Hampel)	<b>Dr. Andreas Hampel, Mainz</b>	📖 48
<b>02 E 10820</b>	Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von Modellberechnungen zum thermo-mechanischen Verhalten und zur Verheilung von Steinsalz (TV5: TUC)	<b>TU Clausthal, Clausthal-Zellerfeld</b>	📖 50
<b>02 E 10830</b>	Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von Modellberechnungen zum thermo-mechanischen Verhalten und zur Verheilung von Steinsalz (TV2: IfG)	<b>IfG Institut für Gebirgsmechanik GmbH, Leipzig</b>	📖 52
<b>02 E 10840</b>	Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von Modellberechnungen zum thermo-mechanischen Verhalten und zur Verheilung von Steinsalz (TV3: KIT-INE)	<b>Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Eggenstein-Leopoldshafen</b>	📖 54
<b>02 E 10850</b>	Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von Modellberechnungen zum thermo-mechanischen Verhalten und zur Verheilung von Steinsalz (TV4: LUH-IUB)	<b>Leibniz Universität Hannover</b>	📖 56
<b>02 E 10860</b>	Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von Modellberechnungen zum thermo-mechanischen Verhalten und zur Verheilung von Steinsalz (TV6: TUBS)	<b>TU Carolo-Wilhelmina zu Braunschweig</b>	📖 58
<b>02 E 10890</b>	Virtuelles Untertagelabor im Steinsalz – Virtus	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln</b>	📖 62
<b>02 E 10900</b>	Virtuelles Untertagelabor im Steinsalz – Virtus	<b>DBE Technology GmbH, Peine</b>	📖 64
<b>02 E 10910</b>	Virtuelles Untertagelabor im Steinsalz – Virtus	<b>Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR), Hannover</b>	📖 66
<b>02 E 10941</b>	Erprobung und Weiterentwicklung moderner Methoden der Sensitivitätsanalyse im Hinblick auf den Sicherheitsnachweis für ein künftiges Endlager - MOSEL	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln</b>	📖 68
<b>02 E 10951</b>	Diffusion in kompaktiertem Salzgrus - DIKOSA	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln</b>	📖 70
<b>02 E 10961</b>	Verbundprojekt: Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im natürlichen Tongestein und in salinaren Systemen – Teilprojekt 1: Karlsruher Institut für Technologie	<b>Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Eggenstein-Leopoldshafen</b>	📖 72



<b>02 E 10971</b>	Verbundprojekt: Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im natürlichen Tongestein und in salinaren Systemen – Teilprojekt 2: Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf	<b>Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e. V., Dresden</b>	📖 74
<b>02 E 10981</b>	Verbundprojekt: Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im natürlichen Tongestein und in salinaren Systemen – Teilprojekt 3: Universität Mainz	<b>Johannes Gutenberg-Universität Mainz</b>	📖 76
<b>02 E 10991</b>	Verbundprojekt: Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im natürlichen Tongestein und in salinaren Systemen – Teilprojekt 4: Universität des Saarlandes	<b>Universität des Saarlandes, Saarbrücken</b>	📖 78
<b>02 E 11001</b>	Verbundprojekt: Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im natürlichen Tongestein und in salinaren Systemen – Teilprojekt 5: Technische Universität München	<b>TU München</b>	📖 80
<b>02 E 11011</b>	Verbundprojekt: Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im natürlichen Tongestein und in salinaren Systemen – Teilprojekt 6: Universität Potsdam	<b>Universität Potsdam</b>	📖 82
<b>02 E 11021</b>	Verbundprojekt: Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im natürlichen Tongestein und in salinaren Systemen – Teilprojekt 7: Technische Universität Dresden	<b>TU Dresden</b>	📖 84
<b>02 E 11031</b>	Verbundprojekt: Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im natürlichen Tongestein und in salinaren Systemen – Teilprojekt 8: Universität Heidelberg	<b>Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg</b>	📖 86
<b>02 E 11041</b>	Kopplung der Softwarecodes FLAC3D und TOUGH2 in Verbindung mit in situ-, laborativen und numerischen Untersuchungen zum thermisch-hydraulisch-mechanisch gekoppelten Verhalten in Tongestein unter Endlagerbedingungen	<b>TU Clausthal, Clausthal-Zellerfeld</b>	📖 88
<b>02 E 11051</b>	Optimierung der numerischen Effizienz von Verfahren zur Sensitivitätsanalyse im Hinblick auf Modelle zur Analyse der Langzeitsicherheit von Endlagern	<b>TU Clausthal, Clausthal-Zellerfeld</b>	📖 90
<b>02 E11061A</b>	Methodik und Anwendungsbezug eines Sicherheitsnachweiskonzeptes für ein HAW-Endlager im Tonstein (AnSichT)	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln</b>	📖 92
<b>02 E11061B</b>	Methodik und Anwendungsbezug eines Sicherheitsnachweiskonzeptes für ein HAW-Endlager im Tonstein (AnSichT)	<b>DBE Technology GmbH, Peine</b>	📖 94
<b>02 E11061C</b>	Methodik und Anwendungsbezug eines Sicherheitsnachweiskonzeptes für ein HAW-Endlager im Tonstein (AnSichT)	<b>Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR), Hannover</b>	📖 96

<b>02 E11062A</b>	Verbundprojekt: Modellierung von Datenungewissheiten auf hybriden Rechnern mit $d^3f$ und $r^3t$ (H-DUR)	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln</b>	📖 98
<b>02 E11062B</b>	Verbundprojekt: Modellierung von Datenungewissheiten auf hybriden Rechnern mit $d^3f$ und $r^3t$ (H-DUR)	<b>Friedrich-Schiller-Universität Jena</b>	📖 100
<b>02 E11062C</b>	Verbundprojekt: Modellierung von Datenungewissheiten auf hybriden Rechnern mit $d^3f$ und $r^3t$ (H-DUR)	<b>Johann Wolfgang-Goethe-Universität Frankfurt am Main</b>	📖 102
<b>02 E11072A</b>	Verbundprojekt WEIMAR: Weiterentwicklung des Smart- $K_d$ -Konzepts für Langzeitsicherheitsanalysen – Teilprojekt GRS	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln</b>	📖 104
<b>02 E11072B</b>	Verbundprojekt WEIMAR: Weiterentwicklung des Smart- $K_d$ -Konzepts für Langzeitsicherheitsanalysen – Teilprojekt GRS	<b>Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e. V., Dresden</b>	📖 106
<b>02 E11082</b>	Vergütung der Auflockerungszone im Salinar (VerA) Phase II – Generierung von Rissystemen einer Auflockerungszone im Korngrößenmaßstab und Überführung der Ergebnisse auf die Makroebene zur Simulation eines Injektionsvorganges	<b>DBE Technology GmbH, Peine</b>	📖 108
<b>02 E11102</b>	Wissenschaftliche Grundlagen zum Nachweis der Langzeitsicherheit von Endlagern	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln</b>	📖 112
<b>02 E11122</b>	Entwicklung chemisch-hydraulischer Modelle für die Prognose des Langzeitverhaltens von Sorelbeton in Salzformationen – Kurztitel: LAVA	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln</b>	📖 116
<b>02 E11182A</b>	Sicherheitsanalytische Untersuchungen für ein Endlager für radioaktive Abfälle in einer diagenetisch überprägten Tonformation in der Nachbetriebsphase - SAnToS	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln</b>	📖 128
<b>02 E11182B</b>	Sicherheitsanalytische Untersuchungen für ein Endlager für radioaktive Abfälle in einer diagenetisch überprägten Tonformation in der Nachbetriebsphase - SAnToS	<b>DBE Technology GmbH, Peine</b>	📖 130
<b>02 E11203A</b>	Verbundprojekt: Stabilität von kompaktiertem Bentonit zur Rückhaltung von Radionukliden in geklüfteten Systemen – Experimente und Modellierung, KOLLORADO-e	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln</b>	📖 136
<b>02 E11203B</b>	Verbundprojekt: Stabilität von kompaktiertem Bentonit zur Rückhaltung von Radionukliden in geklüfteten Systemen – Experimente und Modellierung, KOLLORADO-e	<b>Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Eggenstein-Leopoldshafen</b>	📖 138
<b>02 E11213</b>	Qualifizierung der Rechenprogramme $d^3f$ und $r^3t$ , Kurztitel Quader	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS)</b>	📖 140

<b>02 E 11223</b>	Langzeitsicheres Abdichtungselement aus Salzschnittblöcken – Vorprojekt zur Kalkulation und Qualifizierung der Forschungsarbeiten	<b>mbH, Köln</b> <b>TU Clausthal,</b> <b>Clausthal-Zellerfeld</b>	 142
<b>02 E 11273</b>	Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Vorprojekt (UMB-V)	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS)</b> <b>mbH, Köln</b>	 152



### 1.3 Querschnittsthemen mit Bezug zur Endlagerung

<b>02 E 11162</b>	Studie zur Partitionierung und Transmutation (P&T) hochradioaktiver Abfälle	<b>DBE Technology GmbH, Peine</b>	 124
<b>02 E 11172</b>	Studie zur Partitionierung und Transmutation (P&T) hochradioaktiver Abfälle	<b>Gesellschaft für An- lagen- und Reaktor- sicherheit (GRS) mbH, Köln</b>	 126





## 1.4 Kernmaterialüberwachung

**02 W 6263** Neu- und Weiterentwicklung von Safeguardstechniken und -methoden

**Forschungszentrum  
Jülich GmbH**

 156



## **2 Formalisierte Zwischenberichte**

### **2.1 E-Vorhaben**

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 9944</b>	
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Goelektrische Untersuchung der Aufsättigung von Bentonitbarrieren im HRL-Äspö-Projekt „Prototype Repository“ – Phase 2			
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung			
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.08.2004 bis 28.02.2014		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2013 bis 31.12.2013	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 529.957,00 EUR		<b>Projektleiter:</b> Wieczorek	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

Im Rahmen der Aufwältigung der Sektion II des Prototype Repository unternimmt GRS Laboruntersuchungen zur Validierung der In-situ-Ergebnisse und inspiziert die Elektroden nach zehnjährigem Einsatz.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP1: In-situ-Ermittlung der räumlichen und zeitlichen Wasserverteilung in Gebirge, Bohrloch-Buffer und Streckenversatz

AP2: Laborversuche zur Überprüfung der Korrelation inhomogener Wasserverteilungen in tonhaltigem Versatz mit gemessener Resistivitätsverteilung

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

AP1: Die geoelektrischen Messungen, die seit der Aufwältigung von Sektion II nur noch im Streckenversatz in Sektion I betrieben wurden, wurden beendet. Da ein Rücktransport der Messanlage Ende 2013 aus organisatorischen Gründen nicht möglich war, wurde das Projekt kostenneutral um zwei Monate verlängert.

AP2: Aus der aufgewältigten Sektion II des Prototype Repository erhielt GRS bereits 2012 vereinbarungsgemäß rückgeholte Sensoren aus dem Versatz, Versatzproben sowie zwei Bohrkern aus dem oberen Bereich des Buffers von Lagerbohrloch #5, in die jeweils ein Teil der Elektrodenketten im Buffer eingeschlossen ist. Die Ergebnisse der Untersuchungen an den Proben wurden bereits in vorhergehenden Berichten vorgestellt. Im aktuellen Berichtszeitraum wurde der Beitrag für den Abschlussbericht zu den Prototype Repository Nachuntersuchungen erstellt und an SKB übermittelt.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

AP1: Rücktransport der Messanlage.

AP1/2: Abschließende Auswertung und Bericht.

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

Keine.

<b>Auftragnehmer:</b> DBE Technology GmbH, Eschenstraße 55, 31224 Peine		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10086</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Untersuchungen zur Auswirkung einer Temperaturerhöhung in Tonformationen in Deutschland im Hinblick auf die bautechnische Machbarkeit eines Endlagers und irreversible Veränderungen der potenziellen Wirtsformation -TemTon-		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Endlagersystem		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.08.2006 bis 31.08.2013	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2013 bis 31.08.2013	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 1.860.958,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Jobmann	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Wesentliche Veränderungen einer potenziellen Endlagerformation entstehen durch die bergtechnische Auffahrung der untertägigen Hohlräume und durch die Einbringung einer großen Wärmemenge von den wärmeentwickelnden Abfällen. Es ist Ziel dieses Vorhabens, die Temperaturbelastung auf die geotechnische und geologische Barriere im Zusammenhang mit dem Isolationspotenzial der Wirtsformation sowie mit der ingenieurtechnischen Realisierbarkeit der untertägigen Bohrlochlagerung zu charakterisieren. Untersuchungen haben gezeigt, dass geeignete Endlagerkonzepte für Tonstein-Formationen in Deutschland erreicht werden können, wenn man die Wärmeleitfähigkeit des Barrierematerials durch Zusatzstoffe erhöht. Dadurch wird die eingebrachte Wärme besser in die Tonformation abgeführt. Um diese Konzepte zu prüfen, sind entsprechende Materialuntersuchungen vorgesehen. Die eingebrachte Wärme bedingt auch permanente temperaturinduzierte Spannungsveränderung, deren Einfluss auf die Stabilität von Einlagerungsbohrlöchern und auf die Entwicklung der EDZ analysiert werden soll. In diesem Zusammenhang ist auch die Beteiligung an den Erhitzerversuchen in Bure und Äspö zu sehen, die sowohl die geotechnische als auch die Wirtsformation signifikant thermisch belasten.

Bei organischen Bestandteilen führt eine Temperaturerhöhung zu einer Reifung im Hinblick auf eine Kohlenwasserstoffgenese. Die Reifung organischer Substanz wird anhand von Modellberechnungen quantifiziert. Auch Umwandlungsreaktionen werden durch Temperaturerhöhung beschleunigt und verändern so den chemisch/mineralogischen Stoffbestand des Gesteins. Diesbezügliche Untersuchungen sollen als Basis dienen, um abzuschätzen, mit welchen Veränderungen man durch den Temperaturimpuls rechnen muss.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Thermische Optimierung einer geotechnischen Barriere durch Zusatzstoffe
- AP2: THM-Gesteinsverhalten im Einlagerungsbereich / EDZ und Bohrlochstabilität
- AP3: Veränderung organischer Bestandteile
- AP4: Veränderung anorganischer Bestandteile
- AP5: Mine-by Test in Mont Terri
- AP6: TED-Experiment in Bure
- AP7: TBT-Versuch in Äspö
- AP8: Optimierungsverfahren zur Parameteridentifizierung

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Das Vorhaben wurde im Berichtszeitraum am 31.08. 2013 beendet. Der Abschlussbericht wurde im Entwurf (in englischer Sprache) erstellt und dem Projektträger zur Abnahme vorgelegt. Folgende Auszüge aus dem Bericht mit wesentlichen Ergebnissen sind zusammengefasst:

*Buffer investigations:* The thermal conductivity of bentonite has been investigated in the laboratory by preparing samples of bentonite with different admixtures. It could be demonstrated that the used ad-mixtures are able to increase the thermal conductivity of a buffer material in case there is a need for a better heat dissipation in the disposal concept.

*EDZ investigations:* Opalinus clay samples have been artificially damaged to analyse the permeability evolution during fissure closing. A continuous decrease of permeability was determined during increase of confining pressure and a mathematical expression was identified in terms of a potential function. A permeability-effective porosity relationship for the Opalinus clay was developed based on the theory of fractals which allows the description of rock mass properties by fractal dimensions. As a result, a methodology for calculating permeabilities from the pore size parameters and fractal dimension of fissured rock mass was demonstrated.

*Host rock investigations:* Regarding illitisation it was found that the influence on illitisation reactions is negligible since the temperature and particularly the time span of higher temperatures is too small. With regard to organic compounds in the clay rock, the extent to which the heat released by the waste artificially accelerates maturing and, thus, oil formation has been investigated. The results show that the increase in maturing would be far below measurable limits and needs not be considered in a safety analysis.

Quantifiable conclusions about the retention properties of claystones at increased temperatures were drawn from experimentally determined values about the sorption behaviour of elements or radionuclides. The results show that in principle the sorption capacity and, thus, the retention capacity increase with increasing temperatures.

With regard to hydro-mechanical effects a mine-by test performed at the Mt. Terri URL has been analysed using numerical simulations. The results show, that the chosen modelling approach captures the in-situ observed effects quite well.

The analysis of the heater test at the Bure URL was aimed at identifying physical rock parameters. The anisotropic thermal and hydraulic parameters obtained are in good agreement with the results of laboratory and in-situ measurements. The new implemented constitutive law allowed a suitable description of the permeability evolution in direct vicinity of the heater boreholes. The comparison of the measured and simulated time series of temperature and porewater pressure showed that the developed model and the applied constitutive laws are suited to simulate the host rock behaviour in response to an artificial heating.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Keine.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Jobmann, M., Breustedt, M., Li, S., Polster, M., Schirmer, S. (2013): Investigations on the temperature effects in buffer, EDZ and argillaceous host rock, Final Report, Research project contract no. 02E10086, DBE TECHNOLOGY GmbH, Peine.

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln	<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10367</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Anpassung des EMOS-Programmsystems an moderne Softwareanforderungen	
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung	
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.04.2007 bis 31.03.2016	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2013 bis 31.12.2013
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 3.224.600,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Reiche

### 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

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

AP2: Erarbeitung eines neuen Programmkonzepts.

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

AP3: Codeumstellung und -entwicklung.

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

AP4: Steuerung des Programmablaufs und Anbindung an externe Programme.

Die einzelnen unabhängigen Programmmodule werden in drei Arbeitsschritten miteinander sowie mit externen Programmen verknüpft. Im ersten Schritt werden die globale Programmablaufsteuerung und der Datentransfer zwischen den Modulen neu organisiert. Die weiteren Arbeitsschritte dienen dem Anschluss an externe Programme zur statistischen Analyse und zur grafischen Visualisierung von Ergebnissen.

AP5: Test und Dokumentation.

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

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Arbeitspaket 1

Tatiana Reiche nahm am "HLRS Parallel Programming Workshop" (25.-27.11.2013 am JSC des Forschungszentrums Jülich), einer Einführung in die Programmiermodelle MPI (Message Passing Interface), OpenMP und PETSc (Portable Extensible Toolkit for Scientific Computation) teil.

Im Rahmen des Vortrags "Entwicklung von wissenschaftlicher Software im Bereich Endlagersicherheitsforschung" im Institut für Informatik an der TU Clausthal am 19.12.2013 stellte Tatiana Reiche RepoTREND (Einsatzgebiet, Entwicklungsmethoden, aktueller Entwicklungsstand) vor.

Arbeitspaket 2:

Nach der Einführungsphase der Rechenmodule wurde entschieden, die Fernfeldmodule umzubenennen:



- GeoTREND-POSA (POrous SAaturated) statt GeoTREND-SP,
- GeoTREND-FRAME (FRActured porous MEdia) statt GeoTREND-F,
- GeoTREND-COFRAME (COlloid facilitated transport in FRActured porous MEdia) statt GeoTREND-FC.

Die neuen Modulnamen haben sich als wesentlich prägnanter erwiesen und finden bei den Anwendern eine bedeutend höhere Akzeptanz.

Das RepoTREND-Modul für statistische Rechenläufe RepoSTAR greift auf die externe Bibliothek Simlab 2.0 zu. Wie bereits berichtet wurde, soll diese Bibliothek durch eine neue ersetzt werden, die im Rahmen des Projekts MOSEL (FKZ 02E10941) entwickelt werden soll. In Zusammenarbeit mit dem Team des Projekts MOSEL wurden die Anforderungen an die neu zu entwickelnde Bibliothek ausgearbeitet. Für ADEMOS insbesondere wichtige Aspekte: Anbindung der neuen Bibliothek an RepoSTAR und der Gesamtablauf eines statistischen Rechenlaufs. Folgende neue Anforderungen müssen in das statistische Modul RepoSTAR integriert werden:

- Im Nahfeldmodul Lopus können mehrere Segmente als Ausgabesegmente fungieren. Bis jetzt wurde davon ausgegangen, dass eine Ausgabedatei Ergebnisse eines Ausgabesegments beinhaltet.
- Bis jetzt wird in RepoSTAR durch die Auswahl einzig des Dateiformats (Dateierweiterung) festgelegt, welche Ausgabedatei zur statistischen Auswertung herangezogen werden soll. Weil ein RepoTREND-Rechenlauf aber mehrere Dateien gleichen Formats generieren kann, muss die entsprechende Angabe in RepoSTAR nicht nur das Dateiformat sondern auch den Dateinamen berücksichtigen können.

Das Konzept für entsprechende RepoSTAR-Programmstrukturen wurde entwickelt. Ein Konzept, genannt input-linker, für die folgende Anforderung wurde ausgearbeitet: Es muss möglich sein, einen statistischen Rechenlauf auch so zu spezifizieren, dass die für ein Rechenmodul bereits vorhandenen Ergebnisse als Inputdaten für sein Nachfolgemodul verwendet werden. Durch diese Funktionalität soll die Rechenzeit bei der Wiederholung von statistischen Rechenläufen (z. B. um neue Programme durch Vergleich mit Ergebnissen alter Programme zu verifizieren) erheblich gespart werden können. Eine entsprechende Modulbeschreibung input-linker in XENIA wurde konzipiert und realisiert. Mit der letzten XENIA-Version wurden die sogenannten Statistik-Attribute zur Verfügung gestellt, die eine effiziente Angabe von statistischen Parametern erlauben. Alle Modulbeschreibungen in XENIA wurden an diese Technik angepasst.

Es wurden Anforderungen an das neue Fernfeldmodul GeoTREND-COSA (COlloid facilitated transport in SAaturated porous media) analysiert. Basierend auf den für das Vorgängerprogramm TRAPIC ausgearbeiteten Konzepten wurde das physikalische Modell für GeoTREND-COSA entsprechend neuen Anforderungen angepasst. Die Anpassung bzw. (Neu-/Weiter-)Entwicklung von mathematischen und numerischen Modellen befindet sich in der fortgeschrittenen Phase.

#### Arbeitspaket 3:

Das im oberen Abschnitt beschriebene Konzept input-linker wurde realisiert. Es wurde mit der Umsetzung der beschriebenen Anforderungen in RepoSTAR begonnen. Nachdem die neue C++-Bibliothek für die Multithreading-Programmierung in GeoTREND-FRAME erprobt wurde, wurden bestimmte Programmstrukturen von vorhandenen Rechenmodulen parallelisiert:

- in GeoTREND-COFRAME wird nun der Stofftransport für unterschiedliche Nuklidketten und Einzelnuklide durch mehrere zur Verfügung stehende Prozessoren parallel berechnet,
- in GeoTREND-POSA, -FRAME, -COFRAME und BioTREND wurde die Ausgabe der Ergebnisse in unterschiedliche Ausgabedateien parallelisiert.

#### Arbeitspaket 5:

Für GeoTREND-COFRAME wurden die folgenden umfangreichen Tests durchgeführt:

- Variationsrechnungen: Untersuchung der Sorptionskinetik und Kolloid-Remobilisierung.
- Programmvalidierung: Modellierung und Berechnung des im Rahmen des CFM-Projekts im Untertagelabor Grimsel durchgeführten Experiments (in Zusammenarbeit mit Kollorado-2 FKZ 02E10669 und Kollorado-e FKZ 02E11203A).
- Programmqualifikation: Mit GeoTREND-COFRAME wurden erste Rechnungen für die Bedingungen des finnischen Standorts durchgeführt. Die Ergebnisse werden im Vorhaben Kollorado-2 (FKZ 02E10669) zurzeit mit Experten von POSIVA diskutiert.

Für die Fernfeldmodule GeoTREND-FRAME und GeoTREND-COFRAME wurde die Dokumentation in Form eines GRS-A-Berichts erstellt (weitgehend abgeschlossen). Zu dem im statistischen Modul RepoSTAR umgesetzten Konzept wurde eine ausführliche Dokumentation in Form einer Benutzeranleitung erstellt. Die Benutzerdokumentation für XENIA wurde gründlich überarbeitet. In die Dokumentation wurden alle mit Version 2 umgesetzten Neuerungen eingearbeitet.

Das Projekt ADEMOS wurde im Rahmen des regulären jährlichen GRS-Audits geprüft. Vom externen Auditor wurde nach der Prüfung bestätigt, dass die Projektführung den erforderlichen Qualitätsstandards voll entspricht.

#### 4. Geplante Weiterarbeiten

Eine ausführliche Dokumentation zum Modul *BioTREND* soll erstellt werden.

Weiterhin sollen die Analyse für das Nahfeldmodul *NaTREND* unter der Berücksichtigung des Zwei-Phasen-Flusses durchgeführt und das Konzept dafür entwickelt werden.

#### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln	<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10377</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Untersuchung der THM-Prozesse im Nahfeld von Endlagern in Tonformationen	
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung	
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.05.2007 bis 30.06.2015	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2013 bis 31.12.2013
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 4.172.565,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Zhang

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

Dieses Ziel lässt sich untergliedern in:

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

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

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: *In-situ-Untersuchungen* der mechanisch-hydraulischen Auswirkungen einer Tunnelauffahrung im MTRL auf das umgebende Tonsteingebirge. Diese Untersuchungen werden gemeinsam mit NAGRA, BGR und ANDRA durchgeführt, wobei GRS die Messung von Porenwasserdruck, Permeabilität und Sättigungsänderung übernimmt. Ein weiterer In-situ-Test hat die Untersuchung des Langzeitverformungsverhaltens des Opalinuston im MTRL zum Ziel.
- AP2: *Laboruntersuchungen* am Callovo-Oxfordian-Tonstein und Opalinuston zu Langzeitverformung, Quelldruck/Quellverformung, Schädigung und Verheilung sowie am Auffahrungsrückstand aus dem ULB als Versatzmaterial.
- AP3: *Modellierung* des Mine-By-Experiments, des Langzeitverformungsverhaltens eines Bohrlochs im MTRL und der THM-Laborversuche.
- AP4: *Modellentwicklung* für die Schädigung und Verheilung von Tonstein.
- AP5: *Ergebniszusammenführung und Berichterstattung*.

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

#### *Laboruntersuchungen an Tonstein:*

- Triaxialversuche zur Schädigung und Verheilung bzw. entsprechende Gaspermeabilitätsänderungen beim COX-Tonstein
- Vergleichsversuch zur Quelldruckentwicklung von COX-Tonstein bei Luftbefeuchtung unter konstantem Volumen und unter Axial-Begrenzung ohne Radialbeanspruchung
- Gasmigration vom vorgeschädigten und anschließend verheilten Tonstein mit Messungen von Gasdurchbruchdrücke bzw. Gaspermeabilitäten bei Manteldrücken von 2 bis 15 MPa

#### *Laboruntersuchungen an Tonversatz:*

- Quelldruck und -verformung von kompaktierten Mischungen aus Ausbruchstonstein (COX) und Bentonit (MX80) im COX/MX80-Verhältnis von 20/80 und 40/60
- Wasseraufnahme der kompaktierten Ton-Bentonit-Mischungen bei Luftbefeuchtung
- Wasser- und Gaspermeabilitäten der kompaktierten Mischungen
- Durchführung eines Bohrlochverschlusstests, wobei eine Zentralbohrung in einem Großtonkern mit kompaktiertem COX-MX80-Gemisch gefüllt und die Dichtigkeit des Bohrlochverschlusses gegen Wassertransport untersucht wurde. Leider ist dieser Versuch infolge einer Störung des Testsystems frühzeitig untergebrochen worden.

#### *In-situ-Bohrlochverformung:*

Die Messergebnisse von Sensor 2 & 3 zeigen auch im 2. Hj. einen stationären Verlauf, der minimale Messbereich noch nicht erreicht. Auch ist im Nahbereich der Dilatometersonde noch kein stationäres Porendruckfeld zu erwarten.

#### *Modellierung:*

Ein Stoffansatz für Kriechen von Tonstein ist formuliert worden.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Vorbereitung eines weiteren Bohrlochverschlusstests
- Weiterführung der Laborversuche am Tonstein und Tonversatz
- Entwicklung eines Stoffansatzes für Permeabilitätsänderung von Tonstein in Abhängigkeit von Schädigung und Kompaktion
- Weiterführung der In-situ-Bohrlochmessungen

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Projektabschlussbericht für die erste Phase von 05.2007- 05.2013: Thermo-Hydro-Mechanical Processes in the Nearfield around a HLW Repository in Argillaceous Formations, Band I: Laboratory Investigations, GRS-312; Band II: In-situ-investigations and interpretative modelling, GRS-313.

Zhang C.L.: Sealing of Fractures in Claystone, Journal of Rock Mechanics and Geotechnical Engineering 5 (2013), 214-220.

Li, X.S., Zhang C.L., Röhlig, K.-J.: Simulation of THM processes in buffer-rock barriers of high-level waste disposal in an argillaceous formation, Journal of Rock Mechanics and Geotechnical Engineering 5 (2013), 277-286.

Zhang C.L. 2013. Deformation Behaviour of Clay Rock, EAGE - International Workshop on Geomechanics and Energy – The Ground Energy Source and Storage, Lausanne, Switzerland, 26-28 Nov. 2013

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10608</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Werkzeuge und Daten für die Geochemische Modellierung, Kurztitel: WeDa		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.11.2008 bis 30.06.2014	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2013 bis 31.12.2013	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 1.584.830,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Hagemann	

### 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

- Erstellung eines thermodynamischen Modells für Sulfidspezies
- Ermittlung thermodynamischer Daten für wichtige Hintergrundsalze
- Entwicklung einer Programmgruppe zur Durchführung von Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse für geochemische Modellierungen

### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- Untersuchung der Löslichkeit und Bestimmung der Aktivitätskoeffizienten von H<sub>2</sub>S und Hydrogensulfid in salinaren Lösungen bei 15 - 40 °C. Untersuchung der thermodynamischen Stabilität ausgewählter Schwermetallsulfide und –sulfidokomplexe.
- Kritische Literaturlauswertung zu kolligativen Eigenschaften von Hintergrundsalzen (Nitrate und Perchlorate von Kalium, Natrium und Lithium) und ihrer Wechselwirkungen mit anorganischen Komplexbildnern Hydroxid, Chlorid und Carbonat bei 25 - 90 °C. Ergänzende Wasserdampfdruckmessungen sowie Löslichkeitsmessungen.
- Entwicklung von Werkzeugen zur Durchführung geochemischer Modellrechnungen und Unsicherheitsanalysen in einem Schritt durchzuführen. Hierzu werden drei Programm-Module entwickelt, die die Planung, Durchführung und Auswertung von statistisch begleiteten Rechnungen ermöglichen.

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Mit Hilfe der im 1. Halbjahr 2013 entwickelten, potentiometrischen Methode wurden weitere Aktivitätskoeffizienten von NaHS-Lösungen bestimmt. Ermittelt wurden experimentelle Daten für das System NaHS-Na<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>-H<sub>2</sub>O für 25 °C. Die bereits im System NaHS-NaCl-H<sub>2</sub>O verwendeten ionenselektiven Elektroden (ISE) kamen auch hier zum Einsatz. Die Na<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>-Konzentration variierte bei den Versuchen zwischen 0-2,007 mol/kg. Aus den in den Versuchen gemessenen Redoxspannungen ließen sich über die Nernst-Gleichung Aktivitätskoeffizienten für Na<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> berechnen.

Zur Verbesserung des vorläufig entwickelten thermodynamischen Aktivitätsmodells für die Hintergrundsalze LiClO<sub>4</sub> und NaClO<sub>4</sub> wurden weitere experimentelle Stützstellen benötigt. Diese wurden bei 40 und 90 °C mit jeweils 10 Messwerten zwischen 0,5 und 6 mol/kg durch isopiestic Messungen gewonnen. Für das KNO<sub>3</sub> wurde zunächst ein allgemein anerkanntes Modell aus der Literatur übernommen. Bei genauerer Betrachtung stellte sich es jedoch als ungeeignet heraus. Nach einer detaillierten Literaturrecherche wurde es neu entwickelt.

Für ternäre Lösungen kann aufgrund eigener Messungen wie auch aufgrund von Literaturdaten in der Regel von einer idealen Mischung ausgegangen werden. Für die Ableitung der ternären Wechselwirkungsparameter werden neben den binären Daten der Hintergrundsalze auch die binären Daten der zweiten Komponente benötigt. Hierfür wurde mit der Datenerfassung für LiCl und LiOH begonnen.

Im Berichtszeitraum wurden die Werkzeuge zur Probabilistischen Modellierung geochemischer Prozesse zu weiten Teilen fertig gestellt. Es ist nunmehr für Rechnungen mit Geochemist's Workbench möglich, ausgehend von einer Benutzeroberfläche, Rechnungen zu planen, Faktorunsicherheiten zu definieren und Rechnungen zu starten. Anschließend erfolgen automatisch eine statistische Analyse der Rechenergebnisse sowie eine Unsicherheitsanalyse.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Für die Auswertung der potentiometrischen Messdaten der HS-Versuche für NaCl 40 °C wird eine pH- Korrekturfunktion benötigt, die es erlaubt, pcH-Werte für hochsalinare Lösungen bei dieser Temperatur zu berechnen. Die hierfür notwendigen Versuchsreihen sind für die nächsten Monate geplant. Im Anschluss daran kann die Auswertung der bereits vorliegenden Messdaten erfolgen. Für das H<sub>2</sub>S System werden die Arbeiten zur Ableitung der Wechselwirkungsparameter beendet.
- Abschluss der Arbeiten zu Hintergrundsalzen. Beendigung der Ableitung von Wechselwirkungsparametern für binäre Systeme sowie Entwicklung eines polythermen Datensatzes für ternäre Systeme.
- Abschluss der Arbeiten zur Entwicklung von Werkzeugen zur Unsicherheitsanalyse geochemischer Modellierungen. Ausbau des Funktionsumfangs der einzelnen Rechenmodule, insbesondere im Hinblick auf Sensitivitätsanalyse und Report-Erstellung. Anbindung des Rechencodes PHREEQC, Erstellung der Dokumentation.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<b>Auftragnehmer:</b> DBE Technology GmbH, Eschenstr. 55, 31224 Peine		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10639</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Untersuchung zu Rahmenbedingungen und Aufbau eines Endlager-Monitoring für hochradioaktive Abfälle in verschiedenen Wirtsformationen und Phasen einer Endlagerentwicklung unter Berücksichtigung von Machbarkeit und Unsicherheiten (MonA)		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.01.2009 bis 31.10.2013	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2013 bis 31.10.2013	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 283.149,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Jobmann	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Die Arbeiten sollen als Ergebnis eine analytische Einschätzung der sicherheitstechnischen Relevanz und der praktischen Umsetzbarkeit aller relevanten Überwachungsaspekte liefern. Insbesondere die Konsequenzen, die sich aus möglichen, messtechnisch beobachteten, Abweichungen von Erwartungswerten ergeben, sollen diskutiert werden. Mögliche Folgerungen für den Einsatz von Überwachungssystemen, insbesondere als Datenlieferant für Entscheidungsprozesse, sollen aufgezeigt werden.

Als erster Schritt wird eine Auswahl repräsentativer Überwachungskontexte getroffen. Die Ziele und Strategien werden dann tatsächlichen Prozessen und Parametern zugewiesen, die überwacht werden müssen. Im Anschluss daran werden entsprechende Überwachungssysteme konzipiert und hinsichtlich ihrer Zuverlässigkeit, speziell im Hinblick auf die Signaldiagnostik untersucht. Zuletzt werden Nutzen und Konsequenzen der Überwachungsergebnisse charakterisiert und bewertet. Hierzu wird eine Reihe von Szenarien mit erwarteten und unerwarteten Überwachungsergebnissen analysiert, und es wird untersucht, wie solche Ergebnisse zum Entscheidungsfindungsprozess in einer gestuften Endlagerung beitragen können.

Dieses Vorhaben wird in engem Zusammenhang mit dem EU-Projekt MoDeRn (Monitoring Developments for safe repository operation and staged closure) durchgeführt, an dem 15 Europäische Partner sowie Sandia (USA) und RWMC (Japan) beteiligt sind. Das Projekt MoDeRn hat zum Ziel, einen gemeinsamen internationalen Rahmen bzw. eine übergreifende und umfassende Strategie zur Endlagerüberwachung verfügbar zu machen.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Strategie und Ziele einer Endlagerüberwachung
- AP2: Fallstudien zur Endlagerüberwachung
- AP3: Techniken zur Endlagerüberwachung
- AP4: Szenarienanalyse zur Endlagerentwicklung unter Überwachungsaspekten

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

Das Vorhaben wurde im Berichtszeitraum am 31.10.2013 vertragsgemäß beendet. Sämtliche Arbeitsergebnisse wurden in einem mehrteiligen Abschlussbericht in englischer Sprache in folgender Berichtsstruktur dokumentiert:

Es gibt einen übergeordneten Synthesebericht, in dem die wesentlichen Ergebnisse in übersichtlicher Form für die interessierte Fachöffentlichkeit zusammengefasst sind. Darüber hinaus gibt es einen Bericht zur Rahmenrichtlinie (Monitoring Reference Framework Report) sowie einen Bericht über die technologischen Entwicklungen innerhalb des Projektes (Monitoring Technology Report). Komplettiert wird das Berichtswesen durch den Bericht über die Fallstudien (Case Study Report), einen Bericht über den technischen Stand von Mess- und Monitoringsystemen (State of the Art Report), den Bericht über die Untersuchungen zur Einbindung von Stakeholdern (Stakeholder Report) und die einzelnen Fachberichte über die Arbeiten in den einzelnen Arbeitspaketen.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Keine.

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

MoDeRn (2013a): Monitoring during the Staged Implementation of Geological Disposal: The MoDeRn Project Synthesis (Ed.: M. White, GSL), Final Report, FKZ: 02E10508, EC contract number: 232598.

MoDeRn (2013b): Monitoring Reference Framework Report (Ed.: B. Breen), Final Report, FKZ: 02E10508, EC contract number: 232598.

MoDeRn (2013c): Case Study Report (Ed.: M. Jobmann, DBE TECHNOLOGY), Final Report, FKZ: 02E10508, EC contract number: 232598.

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln	<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10689</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Long-Term Performance of Engineered Barrier Systems, Kurztitel: PEBS	
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Endlagersystem	
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.09.2009 bis 31.08.2014	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2013 bis 31.12.2013
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 1.003.689,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Wieczorek

### 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Mit Blick auf die Langzeitsicherheit eines Endlagers im Tonstein ist ein vertieftes Verständnis gekoppelter Prozesse im Nahfeld in der frühen Nachbetriebsphase notwendig, da das Verhalten der EBS in dieser Phase einen nicht zu vernachlässigenden Einfluss auf den späteren Zustand haben kann. Das EU-kofinanzierte Projekt PEBS der Partner BGR, NAGRA, SKB, GRS, ENRESA, AITEMIN, CIMNE, UDC, CIEMAT, ANDRA, UAM, DM Iberia, Solexperts, TK Consult, Clay Technology, BRIUG und JAEA ist der Verbesserung des Verständnisses der im Nahfeld ablaufenden THM-C-Prozesse und der Verringerung in der Unsicherheit ihrer Beschreibung gewidmet, um dadurch den Nachweis zu ermöglichen, dass die EBS ihre Sicherheitsfunktion erfüllt. Diese Ziele sollen seitens GRS durch Laboruntersuchungen insbesondere zum thermischen Verhalten von Puffermaterialien und Tongestein, durch In-situ-Messungen im Rahmen eines Validierungsexperimentes im Mont Terri URL, durch Modellrechnungen zur Vorhersage und Auswertung dieses Experimentes sowie zur Extrapolation auf lange Zeiträume und durch Mitarbeit bei der Analyse der gesamten Ergebnisse in Bezug auf die Sicherheitsfunktion der EBS unterstützt werden. Die Ergebnisse des Projekts haben direkten Einfluss auf die Endlagerkonzeption und -auslegung und ergänzen damit die Arbeiten des Projekts ERATO.

### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Laboruntersuchungen an Tonstein und Puffermaterial
- AP2: Erhitzerversuch in Mont Terri
- AP3: Prozessmodellierung
- AP4: Langzeitsicherheitsbetrachtung

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP1: Für Sand-Bentonit-Granulat wurden zum Abschluss des Laborprogramms die Messungen der thermischen Parameter bei erhöhtem Wassergehalt durchgeführt. Wassergehalte oberhalb ca. 9 % konnten durch Einstellung der Luftfeuchte im Exsikkator nicht erreicht werden; Proben mussten durch direkte Anmischung erzeugt werden. Bei einer Sättigung von 85 % beträgt der Wassergehalt etwa 25 % und die Wärmeleitfähigkeit ca. 1.6 W/(m\*K).



- AP2: Der Erhitzerversuch HE-E läuft seit 28.06.2011 weitgehend störungsfrei und die Messdaten werden laufend registriert.
- AP3: Für den Erhitzerversuch HE-E wurden zweidimensionale Interpretationsrechnungen durchgeführt, wobei u. a. der Einfluss der Anfangssättigung im Gebirge untersucht wurde. Das Temperaturfeld wurde gut nachgebildet. Hinsichtlich der Langzeitextrapolation wurde ein dreidimensionales thermisch-hydraulisch gekoppeltes Modell eines Tonendlagers (NAGRA-Konzept) entwickelt und berechnet und mit entsprechenden Rechnungen von NAGRA und CIMNE verglichen. Die Ergebnisse werden in den jeweiligen Deliverables veröffentlicht.
- AP4: Beim WP234-Workshop Ende September 2013 wurden die Antworten des Fragenkataloges zu den experimentellen Daten und den Modellierungsfälle für die Langzeitsicherheitsbetrachtung vorausgewertet und die Struktur des WP4-Abschlussberichtes diskutiert. Eine weitere Diskussion fand im Rahmen des Projekttreffens im Dezember 2013 statt. Beim Abschlussbericht übernimmt GRS die Koordination von Case 4 (Geochemische Prozesse).
- Sonstiges: Die Streckenlagerung von BE-Behältern in einem Tonendlager (wie im 1:2 Maßstab im HE-E betrachtet) wird als Alternative zum im Projekt AnSichT entwickelten Referenzkonzept Bohrlochlagerung betrachtet. NAGRA startet einen 1:1 Versuch (Mont Terri Experiment FE) zur Streckenlagerung, der von GRS durch Messungen im Nahbereich im Gebirge und durch Modellierung begleitet werden soll. Hierzu wurden weitere fünf Messbohrlöcher mit Minipiezometern und Temperatursensoren instrumentiert. Außerdem wurden weitere Modellrechnungen zum FE-Experiment durchgeführt.

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

- Aktualisierung des Berichts zu den wärmetechnischen Parametern von Buffermaterialien (PEBS Deliverable D2.2-9)
- Weiterführung des Erhitzerversuchs in Mont Terri
- Berichtsbeitrag zur HE-E Prozessmodellierung (PEBS Deliverable D3.2-2)
- Bericht zu den Prozessmodellierungen zur Langzeitextrapolation (PEBS Deliverable D3.5-4)
- Analyse der Ergebnisse der experimentellen Arbeiten und der Prozessmodellierung hinsichtlich der Langzeitsicherheit eines Tonendlagers (PEBS Deliverable D4.1)
- PEBS Abschlussbericht

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

Johnson, L., P. Sellin, J.C. Mayor, K. Wiczorek, I. Gaus, M. Mente: PEBS: Long-term Performance of the Engineered Barrier System, 8th EC Conference on the Management of Radioactive Waste (Euradwaste '13), Vilnius, 14-16 October 2013.

Gaus I., Wiczorek K., Schuster K., Garitte B., Senger R., Vasconcelos R., Mayor J.C. (submitted): EBS behaviour immediately after repository closure in a clay host rock: HE-E experiment (Mont Terri URL). Submitted to Geological Society Special Pub resulting from the Clay Conference 2012.

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10719</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Komplettierung des Instrumentariums zur Technischen Realisierbarkeit und sicherheitlichen Bewertung von HAW-Endlagern im Salinar (KOMTESSA)		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Endlagersystem		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.12.2009 bis 30.06.2016	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2013 bis 31.12.2013	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 1.299.590,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Wolf	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Vorhaben knüpft unmittelbar an die Ergebnisse des FuE-Vorhabens ISIBEL an. Ziel ist die Vervollständigung des bereits verfügbaren Instrumentariums zur technischen Realisierbarkeit und sicherheitlichen Bewertung von HAW-Endlagern im Salinar.

Schwerpunkte bilden dabei die Entwicklung von alternativen Szenarien für den Sicherheitsnachweis, die Untersuchung der Anwendbarkeit von natürlichen Analoga, der Langzeitnachweis für Verschlussbauwerke, Untersuchungen von Instrumentarien auf Prozesslevel, die Analyse von Gasbildungs- und -transportprozessen sowie die konzeptionelle und numerische Umsetzung der Referenz- und Alternativszenarien in Modelle für den Langzeitsicherheitsnachweis. An Hand des internationalen Standes von Wissenschaft und Technik wird untersucht, wie die neu gewonnenen Erkenntnisse und die Ergebnisse von bereits abgeschlossenen FuE-Vorhaben zu einem Sicherheitsnachweis zusammengeführt werden können.

Die gemeinsame Bearbeitung durch DBE TEC, BGR und GRS gewährleistet eine vollständige und ausgewogene Betrachtung aller Instrumente, die in den verschiedenen Teilen einer Sicherheitsanalyse erforderlich sind. Für die Untersuchungen zum Langzeitnachweis für Verschlussbauwerke wird außerdem das Institut für Endlagerforschung der TU-Clausthal hinzugezogen.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Entwicklung von alternativen Szenarien (gestrichen, s. Halbjahresbericht 2011/1)
  - AP2: Langzeitsicherheitsnachweis für Verschlusskonzepte
  - AP3: Untersuchungen von Instrumentarien für Prozessanalysen
  - AP4: Gasprozesse
  - AP5: Detaillierte Untersuchungen zum Referenzszenario und zu Alternativszenarien
  - AP6: Anwendbarkeit von Natürlichen Analoga
  - AP7: Abschlussbericht / Publikation der ISIBEL-Ergebnisse
  - AP8: Entwicklung einer Methodik zur anforderungsorientierten Konzeption eines HAW-Endlagers und zur Konzeptoptimierung
  - AP9: Arbeiten zum FEP-Katalog
- GRS ist federführend für die Arbeitspakete 3, 4, 5 und 6.

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP3: Der Bericht zu den geochemischen Rechnungen wurde überarbeitet und diskutiert. Die Ergebnisse der hydrogeologischen Rechnungen zum Deckgebirge über dem Salzstock Gorleben haben Modifikationen am Programmcode d<sup>3</sup>f notwendig gemacht. Es wurde begonnen, die bereits erfolgten Änderungen an d<sup>3</sup>f zu testen.
- AP4: Der Abschlussbericht für das Arbeitspaket 4 wurde veröffentlicht (siehe 5.).
- AP5: Mit dem an XENIA angepassten Grubengebäude wurden weitere detaillierte Testrechnungen durchgeführt. Die im Projekt ADEMOS (FKZ 02E10367) neu entwickelten Statistikwerkzeuge für die Konsequenzenanalyse wurden für die Anwendung in probabilistischen Rechnungen in ISIBEL-II übernommen und getestet.
- AP6: Die Endredaktion des Berichtes wurde auf das erste Halbjahr 2014 verschoben.
- AP7: Der englischsprachige Abschlussbericht wurde im Herbst 2013 veröffentlicht (siehe 5.; Projekttreffen mit DBE Technology und BGR am 05.07., 29.10. und 27.08. in Peine).
- AP9: Einige wichtige FEP des VSG FEP-Kataloges wurden als Vorbereitung der Arbeiten im Jahr 2014 in eine englische Version überführt.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- AP3: Die Berichte zu den geochemischen und hydrogeologischen Rechnungen werden im Laufe des Jahres 2014 fertiggestellt.
- AP4: Keine. Das Arbeitspaket ist mit der Veröffentlichung des Abschlussberichts abgeschlossen.
- AP5: Die Überprüfung des für die Konsequenzenanalyse zur Verfügung stehenden probabilistischen Instrumentariums wird fortgeführt. Dazu wird eine Methode entwickelt, wie Referenz- und Alternativszenarien in probabilistische Rechnungen umgesetzt werden können.
- AP6: Im Jahr 2014 erfolgen die Endredaktion und die Veröffentlichung des Berichtes.
- AP7: Keine. Das Arbeitspaket ist mit der Veröffentlichung des Abschlussberichts abgeschlossen.
- AP9: In Zusammenarbeit mit BGR und DBE Technology wird eine englischsprachige Version des VSG FEP-Kataloges erstellt.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

- Rübel, A., Buhmann, D., Meleshyn, A., Mönig, J., Spiessl, S.: Aspects on the gas generation and migration in repositories for high level waste in salt formations. GRS-303, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Braunschweig, 2013.
- Bollingerfehr, W., Buhmann, D., Filbert, W., Keller, S., Krone, J., Lommerzheim, A., Mönig, J., Mrugalla, S., Müller-Hoeppe, N., Weber, J.R., Wolf, J.: Status of the safety concept and safety demonstration for an HLW repository in salt. Summary report, Peine, 2013.

<b>Auftragnehmer:</b> DBE Technology GmbH, Eschenstr. 55, 31224 Peine		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10729</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Komplettierung des Instrumentariums zur Technischen Realisierbarkeit und Sicherheitlichen Bewertung von HAW-Endlagern im Salinar (KOMTESSA)		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Endlagersystem		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.12.2009 bis 30.06.2016	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2013 bis 31.12.2013	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 1.283.972,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Krone	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Vorhaben knüpft unmittelbar an die Ergebnisse des FuE-Vorhabens ISIBEL an. Ziel ist die Vervollständigung des bereits verfügbaren Instrumentariums zur technischen Realisierbarkeit und sicherheitlichen Bewertung von HAW-Endlagern im Salinar.

Schwerpunkte bilden dabei die Entwicklung von alternativen Szenarien für den Sicherheitsnachweis, die Untersuchung der Anwendbarkeit von natürlichen Analoga, der Langzeitnachweis für Verschlussbauwerke, Untersuchungen von Instrumentarien auf Prozesslevel, die Analyse von Gasbildungs- und –transportprozessen sowie die konzeptionelle und numerische Umsetzung der Referenz- und Alternativszenarien in Modelle für den Langzeitsicherheitsnachweis. An Hand des internationalen Standes von Wissenschaft und Technik wird untersucht, wie die neu gewonnenen Erkenntnisse und die Ergebnisse von bereits abgeschlossenen FuE-Vorhaben zu einem Sicherheitsnachweis zusammengeführt werden können.

Die gemeinsame Bearbeitung durch DBE TECHNOLOGY GmbH, BGR und GRS gewährleistet eine vollständige und ausgewogene Betrachtung aller Instrumente, die in den verschiedenen Teilen einer Sicherheitsanalyse erforderlich sind. Für die Untersuchungen zum Langzeitnachweis für Verschlussbauwerke wird außerdem das Institut für Endlagerforschung der TU-Clausthal hinzugezogen.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Entwicklung von alternativen Szenarien
- AP2: Langzeitsicherheitsnachweis für Verschlusskonzepte
- AP2A: Ergänzung des endzulagernden Inventars
- AP3: Untersuchungen von Instrumentarien für Prozessanalysen
- AP4: Gasprozesse
- AP5: Detaillierte Untersuchungen zum Referenzszenario und zu Alternativszenarien
- AP6: Anwendbarkeit von Natürlichen Analoga
- AP7: Abschlussbericht / Publikation der KOMTESSA-Ergebnisse
- AP8: Entwicklung einer Methodik zur anforderungsorientierten Konzeption eines HAW-Endlagers und zur Konzeptoptimierung
- AP9: Arbeiten zum FEP-Katalog

DBE TECHNOLOGY GmbH ist federführend für die Arbeitspakete 2, 2A, 7 und 8 tätig und weiterhin am AP3 und AP9 beteiligt.

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP2: (Langzeitsicherheitsnachweis für Verschlusskonzepte):  
Die TU Clausthal hat die Ergebnisse Ihrer Untersuchungen in einem Entwurf für einen Abschlussbericht zusammengefasst. Dieser Bericht befindet sich z. Z. in der Endabstimmung.
- AP2A: (Ergänzung des endzulagernden Inventars)  
Der Berichtsentswurf über das Abfallmengengerüst der nicht-wärmeentwickelnden radioaktiven Abfälle, die die Annahmebedingungen für das Endlager Konrad möglicherweise nicht erfüllen, befindet sich in der Endabstimmung und wird in Kürze fertiggestellt.
- AP3: (Thermomechanische Berechnungen)  
Die Ergebnisse der durchgeführten Berechnungen und die Ergebnisse werden im Sachstandsbericht (s. u.) dokumentiert.
- AP7: (Abschlussbericht)  
Die Ergebnisse der Projekte ISIBEL/KOMTESSA wurden unter Berücksichtigung der Vorläufigen Sicherheitsanalyse Gorleben und einer Bestandsaufnahme zum Stand von Wissenschaft und Technik für die HAW-Endlagerung im Salz in einem englischen Sachstandsbericht zusammengefasst. Der Bericht soll Anfang 2014 verteilt werden.
- AP8: (Entwicklung einer Methodik zur anforderungsorientierten Konzeption eines HAW-Endlagers und zur Konzeptoptimierung)  
Die Grundlagen und Anforderungen für die Untersuchungen wurden zusammengestellt. Die Grundlagen umfassen das Abfallmengengerüst (gegenüber VSG aktualisiert) sowie die Beschreibung der geologischen Gesamtsituation. Vorgesehen sind Betrachtungen zur Endlagerung im Salz (basierend auf VSG) und im Ton (basierend auf den FuE-Projekten ERATO und ANSICHT). Die Anforderungen an das Endlagerkonzept leiten sich aus dem Regelwerk, aus funktionalen und herstellungsspezifischen Erfordernissen, aus der Langzeitsicherheit ab und werden auch in Hinsicht auf eine Konzeptoptimierung überprüft.
- AP9: (Arbeiten zum FEP-Katalog)  
Mit BGR und GRS wurde das Vorgehen bzgl. der Übersetzung des VSG-FEP-Katalogs für die Übernahme in die NEA-FEP-Datenbank abgestimmt.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- AP2A: Berichtserstellung.
- AP8: Es wird mit der Entwicklung einer Vorgehensweise (Methodik) zur anforderungsorientierten Endlagerkonzeption und –optimierung begonnen.
- AP9: Mit der Übersetzung des VSG-FEP-Katalogs wird begonnen.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Bollingerfehr, W., Buhmann, D., Filbert, W., Keller, S., Krone, J., Lommerzheim, A., Mönig, J., Mru-galla, S., Müller-Hoeppe, N., Weber, J.R. & Wolf, J. (2013): Status of the safety concept and safety demonstration for an HLW repository in salt. Summary report.- FKZ 02E10719 and 02E10729, Bericht-Nr. TEC-15-2013-AB, Peine.

<b>Auftragnehmer:</b> DBE Technology GmbH, Eschenstr. 55, 31224 Peine		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10730</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Restporosität und -permeabilität von kompaktierendem Salzgrus-Versatz in einem HAW-Endlager		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Endlagersystem		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.05.2010 bis 30.04.2014	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2013 bis 31.12.2013	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 463.328,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Franz	

### 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

In dem Vorhaben REPOPERM Phase 2 soll mit Hilfe eines gezielten Laborversuchsprogramms und aktuell zur Verfügung stehender Modelle und Codes der Wissensstand über das Stoffverhalten von Salzgrus im Bereich geringer Porositäten und Permeabilitäten verbessert werden. Auf dieser Grundlage soll die Signifikanz einzelner Prozesse im Hinblick auf den sicheren Einschluss der radioaktiven Abfälle im Wirtsgestein und damit der Langzeitsicherheit des Endlagers überprüft werden.

Da in den bisherigen Arbeiten zu diesem Thema überwiegend trockener Versatz betrachtet wurde und nur wenige Ergebnisse aus dem Bereich kleiner Porositäten (<10 %) vorliegen, soll im Rahmen dieses Vorhabens die Entwicklung der mechanischen und hydraulischen Parameter bei geringen Porositäten versuchsgestützt untersucht werden. Die Auswirkungen eines Lösungskontaktes auf die HM-Eigenschaften des Salzgrusversatzes sollen ebenfalls durch Laborversuche geklärt und die daraus resultierenden Konsequenzen für die Wirksamkeit der Salzgrusbarriere überprüft werden. Basierend auf den Laboruntersuchungen sollen die Berechnungsmodelle für die Kompaktion von Salzgrus verbessert werden.

### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Relevante Szenarien und Randbedingungen
- AP2: Laborversuche
- AP3: Stoffgesetze und Modellberechnungen
- AP4: Auswertung und Berichterstellung

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Ein Ziel war es, die Nutzung alternativer Berechnungscodes zur Modellierung von Prozessen der Salzgruskompaktion zu testen. Im Rahmen der Arbeiten kamen die beiden DEM-Codes PFC3D und 3DEC der Firma Itasca zum Einsatz. Um einen Vergleich zwischen beiden Simulationscodes herstellen zu können, war die Generierung möglichst identischer Partikelproben eine erste Bedingung. In PFC3D wurden sog. Clusterpartikel erstellt; aus diesen Gebilden wurden anschließend konvexe Hüllen gebildet, die in 3DEC als Volumenelemente/ Polyeder

eingelassen werden können. Zu Beginn wurde der Algorithmus zur Generierung der konvexen Hüllen mit der internen Programmiersprache FISH umgesetzt. Bei größeren Modellen war jedoch die Generierungszeit nicht praxistauglich, so dass eine externe Schnittstelle mittels C++ entwickelt wurde. Erste Berechnungen zur Kompaktion dieser konvexen Polyeder in 3DEC zeigen jedoch sehr lange Rechenzeiten. Da die Zonengröße u. a. für die Größe des Zeitschrittes eine Rolle spielt, wurde eine geometrische Optimierung der Polyeder in Betracht gezogen. Zu diesem Zweck wurde die im Vorhaben VIRTUS entwickelte Software eingesetzt, da VIRTUS entsprechende Werkzeuge liefert. Mit der Optimierung konnte zwar eine merkbare Beschleunigung der Rechenzeiten erzielt werden, allerdings liegen sie weiterhin in für die Praxis untauglichen Größenordnungen.

Parallel dazu wurde die Analyse von Partikelmodellen um spezielle Verteilungsfunktionen der statistischen Geometrie erweitert. Seitens der TU Bergakademie Freiberg wurden die Lineare Kontaktverteilungsfunktion, die Sphärische Kontaktverteilungsfunktion, die Paarkorrelationsfunktion und die Ripley's K-Funktion implementiert. Mit Hilfe dieser Funktionen lässt sich der Porenraum quantitativ beschreiben. Als Testfall wurde der Porenraum innerhalb zwei verschiedener einfach generierter Partikelkonfigurationen verglichen. Die erste Probe, bestehend aus einer Packung mit einzelnen Partikeln, enthält eine große Anzahl kleiner Poren, mit einer geringen Größenvarianz. Dies ist auf eine regelmäßige Partikelanordnung und damit dichte Packung zurückzuführen. In der zweiten Probe, mit der identischen Ausgangskonfiguration wurden die Partikel zu Clustern zusammengefasst. Im Vergleich bestehen in dieser Probe mehr Porenräume, die in ihrer Größe stark schwanken. Dies hat eine unregelmäßigere Anordnung und somit lockerere Packung als Ursache. Mit dem Test konnte der Funktionsnachweis der implementierten Funktionen erbracht werden.

Die Analyse des bei DBE TEC verfügbaren Stoffmodells für Kontinuumscodes hat im Vergleich mit den im Projekt behandelten Versuchen und Versuchsabläufen die Grenzen dieses Modells aufgezeigt. Verbesserungsbedarf besteht im Hinblick auf die Abbildung eines transienten Kriechverhaltens und in der Berücksichtigung des Feuchteinflusses. Aus numerischer Sicht stellt gerade die Berücksichtigung des Feuchteinflusses eine erhebliche Schwierigkeit dar, da bei sehr geringer Feuchte bereits kleine Änderungen einen sehr starken Einfluss haben. Die Modellbildung ist noch nicht abgeschlossen.

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

Im Zusammenhang mit der Partikelmodellierung soll überprüft werden, inwieweit die Rechenzeit gesteigert werden kann. Anschließend soll versucht werden, einen Oedometerversuch nachzubilden.

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

Keller, L., Jobmann, M., Schuetz, P., Gasser, P. (2013): On the potential of tomographic methods when applied to compacted crushed rock salt, *Transport in Porous Media*, submitted for publication.

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10740</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Restporosität und -permeabilität von kompaktierendem Salzgrus-Versatz in einem HAW-Endlager		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Endlagersystem		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.05.2010 bis 30.04.2014	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2013 bis 31.12.2013	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 1.248.460,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Kröhn	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

Es wird ermittelt, welche Prozessabläufe hinsichtlich des vollständigen Einschlusses eine besondere Signifikanz besitzen. Experimentelle und modelltheoretische Arbeiten ergänzen die in Repoperm-1 erzielten Ergebnisse und dienen der Verbesserung der Stoffgesetze.

Ziel ist, den Wissensstand über das Stoffverhalten von Salzgrus im Bereich geringer Porositäten und Permeabilitäten zu verbessern und die relevanten Prozesse bei der Konsolidierung von Salzversatz zu ermitteln.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

- AP1: Relevante Szenarien und Randbedingungen
- AP2: Laborversuche
- AP3: Stoffgesetze und Modellrechnungen
- AP4: Auswertung und Berichterstellung



### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im Berichtszeitraum fanden zwei Treffen der Projektpartner zur Steuerung des Gesamtprojekts und zu einzelnen APen statt und ein Treffen der Gruppe „Stoffmodelle“.

Im Langzeitkompaktionsversuche bei trockener Atmosphäre und unterschiedlicher Anfangsfeuchte haben die drei Proben mit unterschiedlicher Anfangsfeuchtigkeit (0 %, 0,1 % und 1 %) eine Porosität von 14 %, 10 % bzw. 2 % erreicht. Die Porosität der völlig trockenen Probe hat sich während des Berichtszeitraums nur noch um 0,2 % verringert. Aus diesem Grund soll die Probe mit einer eingefärbten gesättigten Lösung geflutet werden, um den Effekt eines Laugenzutritts nachzubilden. Ansonsten werden die Kompaktionsbedingungen nicht verändert. Eine Verringerung der Kompaktionsraten der feuchten Probe, die auf das Erreichen der Restporosität hindeuten würde, wurde noch nicht beobachtet.

Ein triaxialer Kompaktionsversuch im Autoklaven mit vier unterschiedlich feuchten Proben (0,3 %, 0,6 %, 1,0 % und 1,3 %) ist begonnen worden, wurde aber nach 159 Tagen wegen irregulären Messwerten zur Porosität in Absprache mit den Projektpartnern abgebrochen. Bei den Nachuntersuchungen konnte ein konstruktiver Fehler identifiziert werden. Außerdem führte die Vorkompaktion auf eine Porosität von 18,6 % zu einer erhöhten Steifigkeit der Proben. Unter Beseitigung dieser Fehler wurde der Versuch für einen neuen Start in 2014 vorbereitet. Darüber hinaus wurden die Anfangsfeuchten auf 0 %, 0,3 %, 0,6 % und 2,0 % korrigiert.

Um die in ihrer mathematischen Formulierung doch recht unterschiedlichen Stoffmodellansätze vergleichend darstellen bzw. Unterschiede herausarbeiten zu können, hat sich die Gruppe „Stoffmodelle“ nach eingehender Diskussion auf eine gemeinsame graphische Darstellung geeinigt. Diese Darstellung zeigt die Kompaktionsrate in Abhängigkeit der Verzerrung und bietet damit die Möglichkeit die tendenziellen Verläufe der unterschiedlichen Modellansätze hinsichtlich Plausibilität und Signifikanz zu beurteilen.

Bei den Arbeiten zum Benchmark „Langzeitkompaktionsversuch“ wurde dem Einfluss von thermischen und hydraulischen Randbedingungen auf das Kompaktionsverhalten nachgegangen und die Ergebnisse der Prognoseberechnung den Projektpartnern vorgestellt und diskutiert.

Lieferschwierigkeiten bei Bauteilen für die Messzellen, die für den Zweiphasenflussversuch vorgesehen sind, haben zu erheblichen Verzögerungen geführt. Der Versuch kann voraussichtlich im Januar 2014 beginnen.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Fortsetzung des Langzeitkompaktionsversuchs in trockener Atmosphäre
- Wiederholung des triaxialen Autoklavversuchs
- Beginn des Pilotversuchs zur Ermittlung von Zweiphasenflussparametern
- THM-gekoppelte Modellierung

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10750</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Untersuchungen zur Robustheit der Sicherheitsaussage zu HAW-Endlagersystemen in magmatischen Wirtsgestein – Kurztitel: URSEL		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Endlagersystem		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.07.2010 bis 30.09.2015	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2013 bis 31.12.2013	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 552.070,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Flügge	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Aufbauend auf den Projekten ASTER und WIBASTA soll die deutsch-russische Zusammenarbeit auf dem Gebiet der Klärung methodischer Fragen der sicherheitlichen Bewertung aber auch der Standortcharakterisierung und -bewertung sowie der Konzeptoptimierung fortgesetzt werden.

Das Projekt orientiert sich an den von russischer Seite im Rahmen des föderalen Zielprogramms „Radiologische Sicherheit“ geplanten Arbeiten zur Erkundung des vorgesehenen Endlagerstandortes Jennissejskij für die erste Ausbaustufe eines Endlagers für gering wärmeentwickelnde langlebige Abfälle und eines Untertagelabors für die Endlagerung stark wärmeentwickelnder hochradioaktiver Abfälle an diesem Standort.

Zur sicherheitlichen Bewertung eines potenziellen HAW-Endlagers in Russland sollen daher die Arbeiten aus ASTER und WIBASTA für das Untersuchungsgebiet Jennissejskij fortgesetzt und aktualisiert werden.

Insgesamt wird das Vorhaben dazu beitragen, die Wissensbasis und das Beurteilungsvermögen zu HAW-Endlagerkonzepten in magmatischen Wirtsgesteinen weiterzuentwickeln, um für die drei grundsätzlich in Frage kommenden Wirtsgesteine über eine wissenschaftlich fundierte Entscheidungsbasis zu verfügen. Die gemeinsame Bearbeitung durch DBE TECHNOLOGY, BGR und GRS gewährleistet eine umfassende und ausgewogene Betrachtung, die in den verschiedenen Teilen einer Sicherheitsanalyse erforderlich sind.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Ausgangsdaten und Sicherheitsnachweiskonzept
- AP2: Begleitung und Optimierung der weiterführenden Erkundungsarbeiten
- AP3: Auswertung der neuen Erkundungsergebnisse
- AP4: Optimierung des Endlagerkonzeptes
- AP5: Präzisierung des sicherheitsanalytischen Modells und Bewertung möglicher radiologischer Konsequenzen
- AP6: Vorläufige Bewertung der Robustheit und Sicherheit des Endlagersystems
- AP7: Projektkoordination

Die GRS ist beteiligt an den Arbeitspaketen 2, 5 und 6.

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Die im Juni 2013 an die beteiligten deutschen Organisationen übergebenen Proben aus der Kernbohrung R12 wurden auf den Wassergehalt, die Gesteinsdichte, die Nutzporosität, die Wärmekapazität, die Wärmeleitfähigkeit und die Temperaturleitfähigkeit untersucht. Für derzeit laufende Untersuchungen an wassergesättigten Proben wurde eine synthetische Lösung verwendet, deren chemische Zusammensetzung der des Grundwassers am Standort Jenissejskij entspricht.

Für eine Aktualisierung der sicherheitsanalytischen Rechnungen und der Grundwasserströmung wurden die im Juni 2013 von VNIPI PT zur Verfügung gestellten Daten gesichtet und ausgewertet. Auf einem Projekttreffen mit VNIPI PT in Moskau am 22.10.2013 wurde die hydrogeologische Situation und daraus abzuleitende Modellvorstellungen nochmals intensiv diskutiert. Aufgrund der Komplexität der Daten wurde gemeinsam mit den Projektpartnern beschlossen, zunächst das bestehende hydrogeologische Modell weiter zu nutzen. Transportrechnungen mit dem Transportcode  $r^3t$  für einen inerten Tracer wurden vorbereitet.

Ergebnisse der sicherheitsanalytischen und hydrogeologischen Rechnungen wurden auf dem Jahreskongress der International Association of Hydrogeologists (<http://iahcongress2013.org/>) vom 15. bis 20.09.2013 in Perth, Australien, vorgestellt. Neben den Rechencodes  $d^3f$  und  $r^3t$  wurde auch das integrierte Programmpaket RepoTREND präsentiert und Anwendungsrechnungen aus den Projekten URSEL, Kolorado-2 und E-DuR gezeigt. Vorhabensrelevante Ergebnisse wurden so dem internationalen Fachpublikum zugänglich gemacht und zur Diskussion gestellt.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Die von NO.RAO übergebenen Kernproben werden von GRS hinsichtlich der Gesamtporosität, der Korndichte, der Permeabilität (trockene und wassergesättigte Proben) und der geomechanischen Eigenschaften analysiert.

Die sicherheitsanalytischen und hydrogeologischen Rechnungen werden laufend an die neuen Ergebnisse der Laboruntersuchungen von GRS und BGR angepasst. Auf der Basis der ersten Transportrechnungen mit  $r^3t$  sollen die Ergebnisse aus dem Nahfeldmodul verwendet werden, um für dosisrelevante Radionuklide (z. B. Cs-135) realistischere Ausbreitungsrechnungen auf Basis des in  $d^3f$  berechneten Strömungsfeldes durchzuführen.

Die Beschreibung der sicherheitsanalytischen Rechnungen und der Grundwassermodellierung wird weitergeführt. Ein Zwischenbericht wird Ende Februar den russischen Partnern zur Verfügung gestellt werden. Auf einem Projekttreffen Anfang März 2014 werden die Ergebnisse und Schlussfolgerungen mit den deutschen und russischen Kollegen diskutiert werden.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Flügge, J., Schneider, A., Gehrke, A., Noseck, U., Wolf, J. (2013): The GRS toolbox for simulating flow and transport in fractured media. 40<sup>th</sup> International Congress of the International Association of Hydrogeologists. 15-20 September 2013, Perth, Australia

<b>Auftragnehmer:</b> DBE Technology GmbH, Eschenstr. 55, 31224 Peine		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10760</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Untersuchungen zur Robustheit der Sicherheitsaussage zu HAW-Endlagersystemen in magmatischen Wirtsgestein – Kurztitel: URSEL		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Endlagersystem		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.07.2010 bis 30.09.2015	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2013 bis 31.12.2013	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 848.119,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Krone	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Die Zielsetzung dieses Vorhabens besteht darin, für ein HAW-Endlager in magmatischen Gesteinen (z. B. Granit) mit einer komplexen geologischen Struktur einen methodischen Ansatz für die sicherheitliche Bewertung, Optimierung sowie Beurteilung der Robustheit des Endlagersystems und der Sicherheitlichkeitsaussage zu erarbeiten und beispielhaft zu erproben. Im Unterschied zu den Endlagerkonzepten im Ton und Salz kann bei der Endlagerung im Granit nicht von einem vollständigen Einschluss der Abfälle durch das Wirtsgestein ausgegangen werden. Mögliche Einschränkungen des Isolationspotenzials der geologischen Barriere werden maßgeblich durch die vorhandenen Kluftsysteme und ihre wahrscheinliche weitere Entwicklung bestimmt. Im Zusammenhang mit der eingeschränkten Kenntnis über die aktuell und zukünftig vorliegenden Kluftsysteme und die damit verbundenen Unsicherheiten wird die Frage geklärt, inwieweit die Sicherheit sich auf weitere Rückhaltefunktionen der geologischen Barriere stützen kann und was die zusätzlichen technischen Barrieren leisten müssen, damit der Nachweis der Einhaltung der Schutzziele mit einer hinreichenden Robustheit geführt werden kann.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Ausgangsdaten und Sicherheitsnachweiskonzept
- AP2: Begleitung und Optimierung der weiterführenden Erkundungsarbeiten
- AP3: Auswertung der neuen Erkundungsergebnisse
- AP4: Optimierung des Endlagerkonzeptes
- AP5: Präzisierung des sicherheitsanalytischen Modells und Bewertung möglicher radiologischer Konsequenzen
- AP6: Vorläufige Bewertung der Robustheit und Sicherheit des Endlagersystems sowie seine weitere Optimierung
- AP7: Projektkoordination

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

Im Rahmen der Projektkoordination erfolgte die Vorbereitung und Durchführung eines weiteren deutsch-russischen Arbeitstreffens in Moskau am 22.10.2013. An diesem Treffen nahmen von russischer Seite auch der Nationale Endlagerbetreiber NO.RAO. und das Geologische Institut Krasnoyarsk teil. Auf dem Treffen wurde der aktuelle Stand der Arbeiten sowie noch offene Fragen diskutiert. Seitens des Geologischen Institutes wurden Ergebnisse von Strömungs- und Transportsimulationen für das Gebiet Yeniseyskiy vorgestellt, die im Zusammenhang mit den Berechnungsergebnissen der GRS diskutiert wurden. In Ergänzung dazu wurde seitens VNIPI PT zudem das aktuelle Behälterkonzept vorgestellt.

Seitens DBE TECHNOLOGY wurden Ergebnisse thermischer Berechnungen vorgestellt, die zum Ziel hatten, zu untersuchen, inwieweit eine zeitlich gestaffelte Einlagerung der einzelnen Behälter sich auf die maximal zu erwartenden Temperaturen im Kern eines Einlagerungsfeldes auswirkt. Bei der bisherigen Betrachtung wurde aus Gründen der Vereinfachung von einer instantanen Einlagerung der Behälter im Modell ausgegangen. Die Ergebnisse zeigen, dass die Höhe der maximalen Temperatur nur unwesentlich beeinflusst wird. Lediglich der Zeitpunkt, wann die maximale Temperatur erreicht wird, verschiebt sich etwa um den Betrag der Dauer der gesamten zeitlich gestaffelten Einlagerung.

Im weiteren Umkreis verschiedener Endlagerstandorte kann das Auftreten von Erdbeben nicht ausgeschlossen werden. Eine offene Frage im Hinblick auf die Auflockerungszone um untertägige Strecken ist, inwieweit es durch das Auftreten von Erdbeben zu einer zusätzlichen Schädigung innerhalb einer Auflockerungszone kommt. Das entsprechende numerische Modell wurde weiter entwickelt und getestet, so dass jetzt auch reale Erdbebenaufzeichnungen als Geschwindigkeits- oder Beschleunigungsrandbedingung eingegeben werden können.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Weiterführung der Arbeiten zur Simulation der thermischen Entwicklung des Endlagers auf Basis der neu zu bestimmenden thermischen Gesteinsparametern an den seitens NO.RAO übergebenen Bohrkernproben nach deren Analyse im Labor.

Weiterführung der Arbeiten zur Simulation einer durch Erdbeben induzierten Erschütterung des Gebirges im Bereich einer aufgefahrenen Strecke und Charakterisierung des Einflusses auf die Auflockerungszone.

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

Keine.

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10770</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Verhalten langlebiger Spalt- und Aktivierungsprodukte im Nahfeld eines Endlagers und Möglichkeiten ihrer Rückhaltung (VESPA)		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Endlagersystem		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.07.2010 bis 30.06.2014	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2013 bis 31.12.2013	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 685.975,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Bischofer	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das primäre Ziel von VESPA ist es, Konservativitäten in den Annahmen, die für die Radionuklide  $^{14}\text{C}$ ,  $^{79}\text{Se}$ ,  $^{129}\text{I}$  und  $^{99}\text{TC}$  in Langzeitsicherheitsnachweisen z. Z. angenommen werden, abzubauen.

Ziel des GRS-Teilprojekts VESPA ist es, thermodynamische Daten für I, Se und Cs in hochsalinaren Lösungen des Systems Na, K, Mg, Ca – Cl,  $\text{SO}_4$  –  $\text{H}_2\text{O}$  bei Temperaturen von 25 – 90 °C zu bestimmen.

Des Weiteren werden Löslichkeitskonstanten von LDH-Verbindungen (Layered Double Hydroxides) in endlagerrelevanten Lösungen bestimmt sowie der aktuelle Wissensstand zu Spalt- und Aktivierungsprodukten dargestellt.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP1: Literaturstudien

AP2: Bestimmung thermodynamischer Daten

AP3: Eingabe thermodynamischer Daten in die Referenzdatenbasis THEREDA

AP4: Vergleichsrechnungen für den Langzeitsicherheitsnachweis

AP5: Zusammenfassender Bericht zum Wissensstand über die Rückhaltung Spalt- und Aktivierungsprodukte

AP6: Überprüfung der Anwendbarkeit eines Verfahrens zur Messung des Redoxpotentials bei hohen Ionenstärken

AP7: Koordination des Verbundvorhabens

AP8: Abschlussbericht

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Bestimmung thermodynamischer Daten:

Durchführung und Auswertung von 7 isopiesticen Töpfen bei 60 °C und 10 bei 90 °C. Ansetzten von isopiesticen Versuchen mit  $\text{MgI}_2$  und  $\text{CaI}_2$  bei 40 °C.

Ansetzten von Löslichkeitsversuchen in den Systemen  $\text{CaSeO}_3\text{-NaCl-H}_2\text{O}$  und  $\text{CaSeO}_4\text{-NaCl-H}_2\text{O}$  bei 90 °C und Beobachten der Gleichgewichtseinstellung bei 25, 40 und 60 und 90 °C.

Ansetzen und Auswerten von Löslichkeitsversuchen mit  $\text{K-Fe}^{\text{II}}\text{-hexacyanoferrat}$  und  $\text{K-Fe}^{\text{III}}\text{-hexacyanoferrat}$  bei 25 °C.

Planung von Redox titrationen in  $\text{Fe}^{\text{II}}\text{-hexacyanoferrat/ Fe}^{\text{III}}\text{-hexacyanoferrat}$  mit variierender KCl-Konzentration.

Vergleichsrechnungen für den Langzeitsicherheitsnachweis:

Auf der Grundlage der von den Projektpartner zur Verfügung gestellten Randbedingungen (Massen von Sorbentien, Löslichkeitsgrenzen, Sorptionskoeffizienten) wurde gezeigt, wie stark sich chemische Effekte auf den Austrag von Iod, Selen, Kohlenstoff-14 und Technetium aus dem Endlager auswirken. In Salzgestein führt die Berücksichtigung von Löslichkeiten zu einem etwa drei Größenordnungen niedrigeren Austrag, in Tongestein sind es vier Größenordnungen. Die Berücksichtigung der Sorption an Eisenkorrosionsphasen führt bei Salzgestein zu einer Senkung des Austrags in Höhe von ca. einer Größenordnung. Bei Tongestein ist der Effekt vernachlässigbar.

Koordination des Verbundvorhabens:

Vor- und Nachbereitung des 7. Projekttreffens im November 2013 zum Verbundvorhaben VESPA.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Bestimmung thermodynamischer Daten:

Fortführung der Isopiestic für die binären Systeme.

Beobachtung der Gleichgewichtseinstellung der Löslichkeitsversuche für  $\text{CaSeO}_3$  und  $\text{CaSeO}_4$  bei 25-90 °C und nach erfolgter Gleichgewichtseinstellung die Analyse der Proben.

Durchführung der Redox titrationen mit  $\text{K-Fe}^{\text{II}}\text{-hexacyanoferrat}$  und  $\text{K-Fe}^{\text{III}}\text{-hexacyanoferrat}$  mit variierender KCl-Konzentration.

Entwicklung der thermodynamischen Aktivitätsmodelle für I, Se und Cs.

Koordination des Verbundvorhabens:

Vor- und Nachbereitung des 8. Projekttreffens zum Verbundvorhaben VESPA in Dresden.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Forschungszentrum Jülich GmbH, Wilhelm-Johnen-Straße, 52428 Jülich		<b>Förderkennzeichen:</b>  <b>02 E 10780</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Verhalten langlebiger Spalt- und Aktivierungsprodukte im Nahfeld eines Endlagers und Möglichkeiten ihrer Rückhaltung (VESPA)		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Endlagersystem		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.07.2010 bis 30.06.2014	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2013 bis 31.12.2013	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 217.340,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Curtius	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Langlebige Spalt- und Aktivierungsprodukte  $^{14}\text{C}$ ,  $^{36}\text{Cl}$ ,  $^{79}\text{Se}$ ,  $^{129}\text{I}$ ,  $^{135}\text{Cs}$  und  $^{99}\text{Tc}$  besitzen eine hohe Mobilität, wenn sie in anionischer Form vorliegen. Ihr Beitrag zur Dosisbelastung in Langzeitsicherheitsberechnungen wird bislang überkonservativ abgeschätzt, da die Rückhalteprozesse im Nahfeldbereich in den Endlagerbarrieren ungenügend bekannt sind. Eine Korrektur dieser überkonservativen Abschätzung wird als Arbeitsziel angestrebt, indem experimentell die Rückhaltekapazitäten der in anionischer Form vorliegenden Radioisotope  $^{75}\text{Se}$ ,  $^{129}\text{I}$ ,  $^{99}\text{Tc}$  an lamellaren Doppelhydroxid-Verbindungen (LDH), die als Endlagerbarriere vorhanden sind, ermittelt werden sollen.

Folgende Teilziele wurden definiert:

- Synthese und Identifizierung von Mischkristall-LDH-Verbindungen (partieller Austausch des zweiwertigen Magnesiums gegen zweiwertiges Cobalt, Eisen und Nickel).
- Zusammenfassung des aktuellen Wissensstandes zur Rückhaltung von Selenit, Iodid und Pertechnetat an LDH-Verbindungen und
- Untersuchungen zur Rückhaltung der anionischen Radionuklidspezies (Selenit, Iodid und Pertechnetat) an den synthetisierten Mischkristall-LDH-Verbindungen

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP1: Synthese und Charakterisierung von modifizierten LDHs.

AP2: Literaturstudie zur Rückhaltung anionischer Spezies an LDH-Verbindungen.

AP3: Rückhaltung anionischer Radionuklidspezies an den modifizierten LDHs

AP4: Ergebnisdokumentation



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

AP1: Arbeiten sind abgeschlossen.

AP2: Arbeiten sind abgeschlossen.

AP3: Arbeiten sind abgeschlossen.

AP4: Noch wurden begonnen.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

AP1: Die Arbeiten hierzu sind abgeschlossen.

AP2: Die Arbeiten hierzu sind abgeschlossen.

AP3: Die Arbeiten hierzu sind abgeschlossen.

AP4: Fortführung der Arbeiten zur Erstellung des Abschlussberichtes.

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

Curtius, H., Kaiser, G., Rozov, K., Neumann, A., Dardenne, K., Bosbach D.: Preparation and Characterization of Fe-, Co-, and Ni-containing MgAl-Layered Double Hydroxides, Clays and Clay Minerals, 61, 425-440, 2013

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e. V., Bautzner Landstr. 400, 01328 Dresden		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10790X</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Verhalten langlebiger Spalt- und Aktivierungsprodukte im Nahfeld eines Endlagers und Möglichkeiten ihrer Rückhaltung (VESPA)		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Endlagersystem		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.07.2013 bis 30.06.2014	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2013 bis 31.12.2013	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 76.356,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Brendler	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Primäres Ziel des Verbundprojektes VESPA mit der Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Braunschweig, des Karlsruhe Institut für Technologie und des Forschungszentrums Jülich ist es, Konservativitäten in den Annahmen, die für die Radionuklide  $^{14}\text{C}$ ,  $^{79}\text{Se}$ ,  $^{129}\text{I}$  und  $^{99}\text{Tc}$  in Langzeitsicherheitsnachweise, z. Z. angenommen werden, abzubauen. Ziel des Teilvorhabens des HZDR ist die Identifikation von Rückhalteprozessen für das Spaltprodukt  $^{79}\text{Se}$ . Dabei werden auch konkurrierende Reaktionen erfasst sowie der Einfluss des Redoxzustandes untersucht. Neben Batchversuchen sind spektroskopische Speziesnachweise ein wichtiger Bestandteil der Untersuchungen. Thermodynamische Daten werden ermittelt und im Fall hinreichender Qualifizierung in die Referenzdatenbasis THEREDA implementiert. Sorptionsparameter werden in die mineralspezifische Sorptionsdatenbank RES<sup>3</sup>T eingebunden. Die Untersuchungen konzentrieren sich auf die Randbedingungen in den Wirtsgesteinen Salz und Ton, der Temperaturbereich umfasst 25 °C bis 90 °C.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Sorptionsversuche  
(Batchversuche von Se an Alumosilikaten und verschiedene Eisen-, Titan- und Aluminiumoxide bei höheren Temperaturen, Feststoffanalyse der Sorbentien, spektroskopische Untersuchung der Oberflächenspezies)
- AP2: Komplexierung von Se bei höheren Temperaturen  
(Mg, Ca, Fe Komplexierung von Se bei höheren Temperaturen)
- AP3: Reduktion von Selen  
(Synthese von Magnetite, Batch Versuche, spektroskopische Untersuchung der Oberflächenspezies)

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

#### AP1: Sorptionsversuche

- Die temperaturabhängige Sorption von Se(VI) an  $\alpha$ -Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> zeigt eine Abnahme der Sorption bei höheren Temperaturen.
- Die Sorption von Se(IV) an  $\alpha$ -Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> unter endlagerrelevanten Bedingungen, wie von der Langzeitsicherheitsanalyse vorgegeben, zeigt eine fast vollständige Sorption.
- Um der Oberflächenkomplexe von Se(IV) an TiO<sub>2</sub> zu erklären, wurden Proben mit EXAFS gemessen. Die Interpretation der Ergebnisse läuft zurzeit.

#### AP3: Reduktion von Selen

- Als weiteres endlagerrelevantes Mineral, wurde Magnetit (Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub>) synthetisiert und charakterisiert. Die Sorptionsversuche laufen zurzeit.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

#### AP1: Sorptionsversuche

- Aufklärung der Oberflächenkomplexe von Se(IV) an Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> mit EXAFS.
- Aufklärung der Temperatureffekte auf die Se(IV) Sorption an TiO<sub>2</sub>, Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> und Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>.

#### AP2: Komplexierung von Se bei höheren Temperaturen

- Temperaturabhängige NMR-Messungen für Se(-II)
- NMR-Experimente zur Komplexbildung von Se(-II) mit Ca<sup>2+</sup> und Mg<sup>2+</sup>
- weitere Experimente zur Validierung der Dimerisierung des wässrigen Se(IV) mittels ESI-TOF, IR- und NMR-Spektroskopie unter Berücksichtigung der Ionenstärke.

#### AP3: Reduktion von Selen

- Aufklärung der Oberflächenkomplexe von Se(IV) an Magnetit mit EXAFS.
- Temperatur- und Ionenstärkeeffekte auf die Se(VI) und Se(IV) Sorption an Magnetit.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Kretzschmar, J.; Jordan, N.; Brendler, E. (2013): <sup>77</sup>Se-NMR spectroscopic investigations on aqueous selenium speciation at higher temperatures and in the presence of divalent metal ions. EURACT-NMR Workshop, 17.-19.07.2013, Karlsruhe, Germany.

Franzen, C.; Hering, D.; Jordan, N. (2013): Retention of selenate at the water-mineral interface in the context of salt dome repositories. Goldschmidt 2013, 25.-30.08.2013, Florence, Italy; Mineralogical Mag. 77(5), 1107.

Jordan, N.; Domaschke, S.; Foerstendorf, H.; Scheinost, A. C.; Weiß, S.; Heim, K. (2013): Sorption of selenium oxyanions onto hematite. 14<sup>th</sup> International Conference on the Chemistry and Migration Behaviour of Actinides and Fission Products in the Geosphere, 08.-13.09.2013, Brighton, United Kingdom.

Foerstendorf, H.; Gückel, K.; Jordan, N.; Rossberg, A.; Brendler, V. (2013): Surface speciation of dissolved radionuclides on mineral phases – A vibrational and X-ray absorption spectroscopic study. 5<sup>th</sup> Asia-Pacific Symposium on Radiochemistry (APSORC 13), 22.-27.09.2013, Kanazawa, Japan.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Hermann-von-Helmholtz-Platz 1, 76344 Eggenstein-Leopoldshafen		<b>Förderkennzeichen:</b>  <b>02 E 10800</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Verhalten langlebiger Spalt- und Aktivierungsprodukte im Nahfeld eines Endlagers und Möglichkeiten ihrer Rückhaltung (VESPA)		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Endlagersystem		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.07.2010 bis 30.06.2014	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2013 bis 31.12.2013	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 665.294,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Geckeis	

### 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Die Qualität von Langzeitsicherheitsnachweisen für Endlager radioaktiver Abfälle hängt stark von dem wissenschaftlichen Verständnis der stattfindenden Prozesse, der Qualität verwendeter Datenbasen sowie von deren konzeptioneller und mathematischer Umsetzung in Modellen ab. Ein weitgehend standortunabhängiger Forschungsbedarf besteht für geochemische Daten und Werkzeuge bezüglich der mobilen Spalt- und Aktivierungsprodukte und deren Rückhalteprozesse in den Endlagerbarrieren, wie z. B. Thermodynamik und Sorption bei höheren Temperaturen und zu Rückhalteprozessen durch Mineralisation, d. h. durch den Einbau in neu gebildete Mineralphasen. Diese Daten wurden für deutsche Endlagerkonzepte bisher unzureichend ermittelt. Im Falle eines Vergleichs von Tonsteinstandorten haben diese Forschungsarbeiten eine entscheidende Bedeutung: Die Ergebnisse erlauben die Ableitung der Größe des einschlusswirksamen Gebirgsbereichs. Die langlebigen Spalt-nuklide  $^{79}\text{Se}$  und  $^{99}\text{Tc}$  gelten in vielen Langzeitsicherheitsrechnungen zu Endlagern für radioaktive Abfälle als dosisbestimmend. Ein Grund für diese Einschätzung ist die Tatsache, dass beide Nuklide anionische Spezies bilden können, die nur geringe Sorption an Mineralphasen eingehen und bei denen die Löslichkeit relevanter Festphasen i. allg. sehr hoch liegt. Im Falle von  $^{99}\text{Tc}$  gilt dies allerdings nur für oxidierende Bedingungen, unter denen sich  $\text{TcO}_4^-$  bildet. Die Arbeiten zur Ermittlung belastbarer Daten zur Redoxchemie des Tc sind daher geeignet, überkonservative Annahmen bzgl. der Tc-Mobilität zu vermeiden. Se bildet auch unter reduzierenden Bedingungen anionische Spezies wie  $\text{Se}^{2-}$ ,  $\text{Se}_2^{2-}$  und  $\text{SeO}_3^{2-}$ , für die ähnliches gilt wie für  $\text{TcO}_4^-$ . Für alle anionischen Se-Spezies ist bekannt, dass sich feste Lösungen mit Mineralphasen wie Pyrit bzw. Calcit bilden können. Für die Radionuklidrückhaltung durch Bildung fester Lösungen existieren jedoch nur wenige belastbare Daten, die im Rahmen des Projekts erarbeitet werden.

### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP0: Dokumentation des State-of-the-Art
- AP1: Aquatische Chemie und Thermodynamik von Tc(IV)
- AP2: Reduktionschemie von Tc(VII) / Tc(IV) in verschiedenen Medien
- AP3: Einfluss der Reduktionskinetik auf die Tc-Migration in natürlichen Systemen
- AP4: Struktureller Einbau von Selen in Mineralphasen (Pyrit, Calcit)
- AP5: Dokumentation und Publikation

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP0: Status: Die Literaturstudie zum State-of-the-Art im Rahmen von AP0 ist abgeschlossen, im Berichtszeitraum wurden keine weiteren Arbeiten hierzu durchgeführt.
- AP1: Status: Die Löslichkeitsexperimente mit Tc(IV)-oxyhydroxid Festphase in carbonatfreien  $\text{NaCl}$ ,  $\text{CaCl}_2$  und  $\text{MgCl}_2$  Lösungen sind abgeschlossen. Die laufenden Arbeiten zur Ableitung eines thermodynamischen Modells werden fortgeführt.

- AP2: Status: Die im Aufstockungsantrag beschriebenen weiterführenden EXAFS Messungen zum Redoxverhalten von Tc(VII)/Tc(IV) bei Anwesenheit von Eisenphasen wurden erfolgreich durchgeführt.
- AP3: Status: Die Arbeiten zur Tc(VII) Reduktionskinetik in Abhängigkeit der eingesetzten  $^{99}\text{Tc(VII)}/^{95}\text{mTc(VII)}$  Konzentration an anoxischem Probenmaterial (Granodiorite aus Äspö, Schweden) und kristallinen Materialien (Nizhnekansk Granit Massiv, Russland) sind abgeschlossen. Säulenversuche an natürlichen Klüften aus dem Äspö Granodiorite mit Pulsinjektionen von HTO,  $^{36}\text{Cl}$  und  $^{95}\text{mTc(VII)}$  unter Variation der Verweilzeit sind durchgeführt und zeigten eine verweilzeitabhängigen Tc- Wiedererhalt. Sorptionsisothermen zur Tc(VII) Magnetit- Wechselwirkung bei pH 7 und 8 werden mit einem neuen  $^{95}\text{mTc}$  Stammlösung fortgeführt.
- AP4: Status: Die Veröffentlichung über die Struktur der Selenit Einbauspezies in Calcit (P-GIXAFS) und experimentell und theoretisch bestimmte thermodynamische Parameter zur Modellierung von Einbau und Adsorption ist eingereicht und wurde positiv begutachtet, sodass sie bald akzeptiert und veröffentlicht werden sollte. Weitere Aragonit- Rekristallisationsexperimente zur Überprüfung/Verbesserung des in der Publikation vorgeschlagenen thermodynamischen Modells laufen. Erste Ergebnisse scheinen das bisherige Model zu untermauern. Die Studien zur Wechselwirkung von Selenid mit Mackinawit sind abgeschlossen und ein Manuskript zu den spektroskopischen Daten (EXAFS/XANES) ist veröffentlicht. Die experimentellen Arbeiten zur Wechselwirkung mit Pyrit sind auf Grund technischer Probleme weiterhin verzögert.
- Arbeiten im Rahmen des Aufstockungsantrags 2013: Die Arbeiten zu Tc werden innerhalb AP1 und AP2 aufgeführt. Für den Aufbau einer Anlage zur Analyse der  $^{14}\text{C}$  Speziation wurde ein spezieller Handschuhkasten angefertigt und im Kontrollbereich des INE aufgebaut. Es wurden erste Tests und Kalibrierungsarbeiten mit  $^{14}\text{C}$  dotierten Referenzproben durchgeführt. Zur Vorbereitung von Experimenten zur  $^{129}\text{I}$  Rückhaltung wurden verschiedene Methoden zur kontrollierten Synthese von monomineralischen Sorelphase-Proben angewendet. Hinreichend reine Sorelphase-Proben werden in salinaren Lösungen vor-equilibriert.

#### 4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1: Ableitung eines thermodynamischen Modells (SIT, Pitzer) zur Implementation in THEREDA.
- AP2: Auswertung/Interpretation der innerhalb des Aufstockungsantrags durchgeführten EXAFS Untersuchungen.
- AP3: Abschluss der Tc(VII) Sorptions- Untersuchungen an synth. Magnetit bei Konzentrationen unterhalb der Tc(IV) Löslichkeit mit  $^{95}\text{mTc}$  und synth. Eisenoxiden. Quantifizierung des isotopenaustauschbaren Fe mittels stabilem  $^{57}\text{Fe}$  von kristallinen Materialien und Magnetit. Fortführung der  $^{95}\text{mTc(VII)}$  Säulenexperimente mit der „stop-flow“ Technik zur Erhöhung der Kluft- Verweilzeit.
- AP4: Calcit Rekristallisationsversuche im Gleichgewicht in Gegenwart von  $^{79}\text{Se(IV)}$  und  $^{45}\text{Ca}$  werden im Rahmen einer Bachelorarbeit (Leonie Vogt, Uni KA) durchgeführt. Synchrotron-Strahlzeit für Oberflächendiffraktionsexperimente zu Se(IV) Adsorption/Einbau in Calcit und zur  $\mu$ -XAFS Charakterisierung Se-haltiger Bodenproben aus Indien ist für März/April 2014 genehmigt. Die Umwandlung von Mackinawit in Pyrit soll mit reinem FeS und mit Selenid-dotiertem Mackinawit untersucht werden. XRD und REM Messungen sollen zeigen, ob Se die Synthese beeinflusst, und ob sich eine separate Se-Phase bildet.
- Arbeiten im Rahmen des Aufstockungsantrags 2013: Die Arbeiten zur Tc Chemie werden innerhalb AP1 und AP2 aufgeführt. Die Arbeiten zur  $^{14}\text{C}$  Speziation werden innerhalb des am INE aufgebauten Handschuhkastens mit Hinblick auf eine spätere Anwendung im Kontext von HAW Korrosionsexperimenten weiter optimiert. Basierend auf vorläufigen Ergebnissen zur  $^{129}\text{I}$  Rückhaltung in Sorelzement werden Experimente mit synthetisierten reinen Sorelphasen in Salzlösungen equilibriert, die mit  $^{129}\text{I}$  dotiert werden sollen.

#### 5. Berichte, Veröffentlichungen

- Manuskript von Yalcintas et al. zur Tc-Redoxchemie bei hoher Ionenstärke wird Anfang 2014 bei Radiochimica Acta eingereicht (AP2).
- Heberling, et al. "A thermodynamic adsorption/entrapment model for selenium(IV) co-precipitation with calcite", Geochim. Cosmochim. Acta (submitted).
- Totskiy et al. (2013): "Tc(VII) sorption on natural granitic rocks and synthetic magnetite." Final Workshop Proceedings, 7th EC FP CP-CROCK, KIT Scientific Reports.
- Finck et al. „Selenide Retention by Mackinawite“, Environ. Sci. Technol., 46 (2012) 10004-10011.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Dr. Andreas Hampel, Grünberger Str. 56, 55129 Mainz		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10810</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von Modellberechnungen zum thermo-mechanischen Verhalten und zur Verheilung von Steinsalz (TV1: Dr. Andreas Hampel)		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2010 bis 30.09.2016		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2013 bis 31.12.2013
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 632.854,00 EUR		<b>Projektleiter:</b> Dr. Hampel

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Die Zusammenarbeit der Projektpartner Dr. Hampel, TU Clausthal, IfG Leipzig, KIT Karlsruhe, Universität Hannover und TU Braunschweig (FKZ 02E10810 bis 02E10860) hat das Ziel, Instrumentarien für die Nachweise zur sicheren und dauerhaften Untertage-Endlagerung von wärmeentwickelnden hochradioaktiven Abfällen in Steinsalzformationen zu verbessern. Als assoziierter Partner beteiligen sich die Sandia National Laboratories, Albuquerque (NM, USA).

Das Vorhaben setzt inhaltlich die beiden BMBF-Verbundprojekte "Die Modellierung des mechanischen Verhaltens von Steinsalz: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen" (Laufzeit: 01.04.2004 bis 30.11.2006) und "Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von 3D-Modellberechnungen zum mechanischen Langzeitverhalten von realen Untertagebauwerken im Steinsalz" (Laufzeit: 01.08.2007 bis 31.07.2010) fort.

In diesem BMWi-Verbundprojekt führt jeder Partner mit seinem Stoffgesetz und Programmsystem Benchmark-Modellberechnungen zur Spannungs-, Verformungs-, Dilatanz- und Schädigungsentwicklung in einer realen Untertagestruktur im Steinsalz durch. Im Vordergrund steht dabei nun das thermo-mechanische Verhalten und die Schädigungsrückbildung (Verheilung). Das Projekt dient einer realitätsnäheren Einschätzung der Stoffgesetzfähigkeiten im Hinblick auf deren Einsatz bei der praktischen Anwendung der Berechnung und Sicherheitsbewertung von Endlagern für wärmeentwickelnde Abfälle im Steinsalz.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Durchführung eines Start-Workshops
- AP2: Planung, Durchführung und Auswertung spezifischer Laborversuche
- AP3: Nachrechnung der Laborversuche, Bestimmung salztypspezifischer Kennwerte
- AP4: 3D-FDM/FEM-Modellierung der Untertagestrukturen, Auswertung der Ergebnisse
- AP5: Durchführung weiterer Workshops und Abstimmungen der Projektpartner
- AP6: Erstellung detaillierter Einzelberichte durch die Projektpartner
- AP7: Vergleich der Ergebnisse, Ausarbeitung von Schlussfolgerungen und Empfehlungen
- AP8: Durchführung einer öffentlichen Abschlussveranstaltung
- AP9: Erstellung des Abschlussberichts und Veröffentlichung der Projektergebnisse

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Der Zuwendungsempfänger koordiniert das Vorhaben und betreut die Kooperation mit den Sandia National Laboratories. Er beteiligt sich an dem Stoffgesetzvergleich im Teilvorhaben 1 mit dem von ihm entwickelten Composite-Dilatanz-Modell (CDM) und verwendet für die Modellberechnungen der Untertagestrukturen das Finite-Differenzen-Programm FLAC3D (Itasca).

Im Berichtszeitraum entwickelte der Zuwendungsempfänger die Modellierung der Verheilung mit seinem Stoffgesetz weiter, die auch eine darauf abgestimmte Modifikation der Modellierung der Dilatanz- und Schädigungsentwicklung bedingte. Mit dem verbesserten CDM rechnete er zahlreiche Kriech- und Festigkeits-Laborversuche des IfG bei 27, 60 und 90 bzw. 100 °C sowie zwei Verheilungsversuche der TUC mit Asse-Speisesalz nach. Dabei bestimmte er einen einheitlichen salztypspezifischen Kennwertsatz für sein Stoffgesetz. Durch Nachrechnungen der isothermen freien Konvergenz eines tiefen Bohrlochs in der Schachanlage Asse II und Vergleich mit In-situ-Messdaten passte er den Kennwertsatz an die Untertage-lokation an, wobei nur zwei Parameterwerte für das stationäre Kriechen modifiziert werden mussten. Mit dem resultierenden Kennwertsatz führte er mehrere Simulationen mit dem von R.-M. Günther (IfG) erstellten und mit allen Partnern abgestimmten Modell des Dammjochs in der Schachanlage Asse II durch.

Gemeinsam mit den Partnern führte der Zuwendungsempfänger den 10. und 11. Projektworkshop am 04.-05.09.2013 in Hannover und am 16.09.2013 in Leipzig durch und präsentierte gemeinsam mit J.G. Argüello (Sandia), U. Düsterloh (TUC) und T. Popp (IfG) Arbeiten des Verbundes auf dem 4th US-German Workshop on Salt Repository Research, Design and Operation am 17.-18.09.2013 in Berlin.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Der Zuwendungsempfänger wird die Ergebnisse seiner Berechnungen des Dammjoch-Modells auswerten und die Ergebnisse der Projektpartner detailliert vergleichen. Außerdem wird er ältere Laborversuche von Sandia mit Steinsalz aus der Waste Isolation Pilot Plant (WIPP) in New Mexico (USA) nach dem aktuellen Stand der Wissenschaft und mit aktuellen Verfahren neu auswerten und die Ergebnisse mit denen von aktuellen Laborversuchen des IfG und der TUC mit neu erbohrtem Material aus der WIPP vergleichen. Anschließend wird er die neuen Versuche mit den beiden WIPP-Steinsalztypen „clean salt“ und „argillaceous salt“ nachrechnen und die zugehörigen salztypspezifischen Parameterkennwerte für sein CDM-Stoffgesetz bestimmen. Mit diesen wird er dann die geplanten Benchmark-Berechnungen des „Room D“ aus der WIPP beginnen.

Gemeinsam mit den Partnern wird der Zuwendungsempfänger den 12. und 13. Projektworkshop am 16.-17.01.2014 in Karlsruhe und am 28.-29.05.2014 in Albuquerque, New Mexico, USA durchführen.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Neueste Literatur zum CDM-Stoffgesetz und zum aktuellen Verbundprojekt:

A. Hampel (2012): The CDM constitutive model for the mechanical behavior of rock salt: Recent developments and extensions. In: P. Bérest, M. Ghoreychi, F. Hadj-Hassen & M. Tijani (Hrsg.): Proceedings of the 7th Conference on the Mechanical Behavior of Salt, Paris, 16.-19. April 2012. S. 45-55. CRC Press/Balkema, Leiden NL.

A. Hampel, J.G. Argüello, F.D. Hansen, R.M. Günther, K. Salzer, W. Minkley, K.-H. Lux, K. Herchen, U. Düsterloh, A. Pudewills, S. Yildirim, K. Staudtmeister, R. Rokahr, D. Zapf, A. Gährken, C. Missal & J. Stahlmann (2013): Benchmark Calculations of the Thermo-Mechanical Behavior of Rock Salt – Results from a US-German Joint Project. In: Proceedings of the 47th US Rock Mechanics/Geomechanics Symposium, San Francisco, CA, USA, 23.-26. Juni 2013. American Rock Mechanics Association (ARMA).

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Technische Universität Clausthal, Adolph-Roemer-Str. 2a, 38678 Clausthal-Zellerfeld		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10820</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von Modellberechnungen zum thermo-mechanischen Verhalten und zur Verheilung von Steinsalz (TV5: TUC)		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2010 bis 31.03.2016	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2013 bis 31.12.2013	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 791.203,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Lux	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Die Zusammenarbeit der Projektpartner Dr. Hampel, TU Clausthal, IfG Leipzig, KIT Karlsruhe, Universität Hannover und TU Braunschweig (FKZ 02E10810 bis 02E10860) hat das Ziel, Instrumentarien für die Nachweise zur sicheren und dauerhaften Untertage-Endlagerung von wärmeentwickelnden hochradioaktiven Abfällen in Steinsalzformationen zu verbessern. Als assoziierter Partner beteiligen sich die Sandia National Laboratories, Albuquerque (NM, USA).

Das Vorhaben setzt inhaltlich die beiden BMBF-Verbundprojekte "Die Modellierung des mechanischen Verhaltens von Steinsalz: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen" (Laufzeit: 01.04.2004 bis 30.11.2006) und "Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von 3D-Modellberechnungen zum mechanischen Langzeitverhalten von realen Untertagebauwerken im Steinsalz" (Laufzeit: 01.08.2007 bis 31.07.2010) fort.

In diesem BMWi-Verbundprojekt führt jeder Partner mit seinem Stoffmodell und Programmsystem Benchmark-Modellberechnungen zur Spannungs-, Verformungs-, Dilatanz- und Schädigungsentwicklung in einer realen Untertagestruktur im Steinsalz durch. Im Vordergrund stehen dabei nunmehr das thermo-mechanische Verhalten und die Schädigungsrückbildung (Verheilung) von Steinsalz. Das Projekt dient einer realitätsnäheren Einschätzung der Stoffmodellfähigkeiten im Hinblick auf deren Einsatz bei der praktischen Anwendung der Berechnung und Sicherheitsbewertung von Endlagern für wärmeentwickelnde Abfälle im Steinsalz.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Durchführung eines Start-Workshops
- AP2: Planung, Durchführung und Auswertung spezifischer Laborversuche
- AP3: Nachrechnung der Laborversuche, Bestimmung salztypspezifischer Kennwerte
- AP4: 3D-FDM/FEM-Modellierung der Untertagestrukturen, Auswertung der Ergebnisse
- AP5: Durchführung weiterer Workshops und Abstimmungen der Projektpartner
- AP6: Erstellung detaillierter Einzelberichte durch die Projektpartner
- AP7: Vergleich der Ergebnisse, Ausarbeitung von Schlussfolgerungen und Empfehlungen
- AP8: Durchführung einer öffentlichen Abschlussveranstaltung
- AP9: Erstellung des Abschlussberichts und Veröffentlichung der Projektergebnisse



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

Im Berichtszeitraum führten die Projektpartner am 04./05. September 2013 in Hannover (veranstaltet vom IUB Hannover) sowie am 16. September 2013 (veranstaltet vom IfG Leipzig) jeweils einen Projekt-Workshop durch.

Auf dem Projekt-Workshop in Hannover wurden von den Projektpartnern numerische Simulationsergebnisse dargestellt und diskutiert. Diesbezüglich präsentierte der Zuwendungsempfänger numerische Simulationsergebnisse zur Untertagesituation „Dammjoch“. Diese Situation wurde im Berichtszeitraum mit einem neuen einheitlichen Berechnungsmodell simuliert, auf das sich die Projektpartner auf dem Workshop verständigt hatten. Im Ergebnis ergaben die nachfolgenden Berechnungen beim Zuwendungsempfänger vergleichbare Ergebnisse zu den bereits durchgeführten Simulationen. Für die Simulation dieser Untertagestruktur wurden darüber hinaus numerische Re-Analysen von Kriechversuchen bei unterschiedlichen Temperaturen zur Parameterbestimmung des Stoffmodells Lux/Wolters vorgenommen. Der durchgeführte Projektworkshop in Leipzig diente der Abstimmung der projektbezogenen Vorträge auf dem 4. US-German Workshop on Salt Repository Research, Design and Operation in Berlin am 17./18.10.2013. Bei diesem Workshop in Berlin wurden Laborergebnisse des Zuwendungsempfängers präsentiert.

Nach umfangreichen Modifikationen der Versuchsanlagen wurden nach der Durchführung von Probeversuchen zwei Verheilungsversuche neu aufgesetzt. Diese Versuche sind Wiederholungsversuche, da bei einigen der zuvor durchgeführten Versuche Messungenauigkeiten in der Dilatanzmessung während den langen Versuchszeiten von mehreren Monaten auftraten.

Darüber hinaus wurden sowohl Festigkeitsversuche wie auch Kriechversuche mit Salz der Lokation WIPP-Site (New Mexico / USA) durchgeführt. Diese Versuche sind Bestandteil eines größeren Versuchsprogramms, das der Parameterbestimmung für die Stoffmodelle der Partner dienen soll, um darauf aufbauend durchgeführte Erhitzerversuche im Endlager WIPP-Site numerisch zu simulieren.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Der Zuwendungsempfänger wird die Berechnungsergebnisse zur Situation „Dammjoch“ dem Projektkoordinator für den Ergebnisvergleich zwischen den Projektpartnern übermitteln und eine Parameterbestimmung für das Salz der Lokation WIPP-Site durchführen. Daneben werden die zwei gestarteten Verheilungsversuche mit den neu modifizierten Anlagen wiederholt sowie das geplante Versuchsprogramm mit WIPP-Salz fortgeführt.

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

Hampel, A., R.-M. Günther, K. Salzer, W. Minkley, A. Pudewills, B. Leuger, D. Zapf, R. Rokahr, K. Herchen, R. Wolters, U. Düsterloh (2010): Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von 3D-Modellberechnungen zum mechanischen Langzeitverhalten von realen Untertagebauwerken im Steinsalz. Abschlussbericht (Einzelberichte + Synthesebericht) z. BMBF-Verbundprojekt (FKZ 02C1577-1617), Karlsruher Institut für Technologie, Projektträger PTKA-WTE.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> IfG Institut für Gebirgsmechanik GmbH, Friederikenstr. 60, 04279 Leipzig		<b>Förderkennzeichen:</b>  <b>02 E 10830</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von Modellberechnungen zum thermo-mechanischen Verhalten und zur Verheilung von Steinsalz (TV2: IfG)		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2010 bis 31.03.2016		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2013 bis 31.12.2013
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 977.150,00 EUR		<b>Projektleiter:</b> Dr. Salzer

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Die Zusammenarbeit der Projektpartner Dr. Hampel, TU Clausthal, IfG Leipzig, KIT Karlsruhe, Universität Hannover und TU Braunschweig (FKZ 02E10810 bis 02E10860) hat das Ziel, Instrumentarien für die Nachweise zur sicheren und dauerhaften Untertage-Endlagerung von wärmeentwickelnden hochradioaktiven Abfällen in Steinsalzformationen zu verbessern. Als assoziierter Partner beteiligen sich die Sandia National Laboratories, Albuquerque (NM, USA).

Das Vorhaben setzt inhaltlich die beiden BMBF-Verbundprojekte "Die Modellierung des mechanischen Verhaltens von Steinsalz: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen" und "Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von 3D-Modellberechnungen zum mechanischen Langzeitverhalten von realen Untertagebauwerken im Steinsalz" fort. Im März 2013 erfolgte eine Verlängerung für die WIPP-site-spezifischen Untersuchungen.

In diesem BMWi-Verbundprojekt führt jeder Partner mit seinem Stoffgesetz und Programmsystem Benchmark-Modellberechnungen zur Spannungs-, Verformungs-, Dilatanz- und Schädigungsentwicklung in einer realen Untertagestruktur im Steinsalz durch. Im Vordergrund steht dabei nun das thermo-mechanische Verhalten und die Schädigungsrückbildung (Verheilung). Das Projekt dient einer realitätsnäheren Einschätzung der Stoffgesetzfähigkeiten im Hinblick auf deren Einsatz bei der praktischen Anwendung der Berechnung und Sicherheitsbewertung von Endlagern für wärmeentwickelnde Abfälle im Steinsalz.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Durchführung eines Start-Workshops
- AP2: Planung, Durchführung und Auswertung spezifischer Laborversuche
- AP3: Nachrechnung der Laborversuche, Bestimmung salztypspezifischer Kennwerte
- AP4: 3D-FDM/FEM-Modellierung der Untertagestrukturen, Auswertung der Ergebnisse
- AP5: Durchführung weiterer Workshops und Abstimmungen der Projektpartner
- AP6: Erstellung detaillierter Einzelberichte durch die Projektpartner
- AP7: Vergleich der Ergebnisse, Ausarbeitung von Schlussfolgerungen und Empfehlungen
- AP8: Durchführung einer öffentlichen Abschlussveranstaltung
- AP9: Erstellung des Abschlussberichts und Veröffentlichung der Projektergebnisse

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im Berichtszeitraum führten die Partner am 4./5. September in Hannover und am 16. September in Leipzig jeweils einen Projekt-Workshop durch. Auf den Workshops wurden Berechnungsergebnisse zu den gemeinsam vereinbarten und von allen Partnern zu berechnenden Untertagestrukturen vorgestellt und besprochen. Außerdem wurden Labor- und In-situ-Daten sowie Modellansätze zum thermo-mechanischen Verhalten und zur Verheilung von Steinsalz diskutiert und die Rahmenbedingungen für weitere Modellberechnungen gemeinsam festgelegt.

Das vorliegende Teilvorhaben 3 beteiligt sich mit dem visko-elasto-plastischen Stoffmodell nach Minkley und dem Erweiterten Dehnungs-Verfestigungsansatz nach Günther/Salzer am Stoffgesetzvergleich. Dabei wird das Programm FLAC3D (Fa. Itasca) verwendet. Außerdem ist das IfG maßgeblich an der Planung und Durchführung der Laborversuche zur Ableitung der Stoffmodellparameter beteiligt.

Das IfG hat den 10. Projekt-Workshop gemeinsam mit den Partnern am 4. und 5. September an der Universität Hannover sowie den 11. Projekt-Workshop am 16. in Leipzig vorbereitet und durchgeführt. Auf den Workshops wurden die Ergebnisse der bisherigen Arbeiten sowie der Zusammenarbeit mit Sandia National Laboratories, insbesondere die Fortschritte bei der Realisierung des geplanten Laborprogramms an dem von Sandia National Laboratories zur Verfügung gestellten Großlochbohrkernen aus der WIPP-site vorgestellt und diskutiert. Diese Laborversuche schaffen die Voraussetzung für die Durchführung der in der Verlängerungsphase geplanten Benchmark-Berechnungen für Room B und D in der WIPP-site mit und ohne Erhitzer.

Im Berichtszeitraum hat das IfG die geplanten triaxialen Druck- und Kriechversuche bei unterschiedlichen Manteldrücken und Temperaturen (30 °C, 60 °C und 90 °C) am sogenannten „clean salt“ der WIPP-site fast und die Prüfkörperherstellung aus dem sogenannten „argillaceous salt“ der WIPP-site zum größten Teil abgeschlossen, wobei Ende Oktober 50 große Prüfkörper der TU Clausthal übergeben wurden. Die geplanten triaxialen Kriechversuche bei unterschiedlichen Manteldrücken und Temperaturen (30 °C, 60 °C und 90 °C) an dieser Salzvarietät wurden ebenfalls begonnen.

Außerdem hat das IfG weitere Verbesserungen bei der Nachrechnung der Verformungs- und Verheilungsprozesse am Dammjoch erzielt und einen einheitlichen Eingabe- und Ausgabefile zum Dammjoch für alle Projektpartner erarbeitet und übergeben.

Auf dem „4th US-German Workshop on Salt Repository Research, Design and Operation“ vom 17.-18. September in Berlin wurde vom IfG u. a. ein Vortrag zum Stand der Laborversuche am WIPP-Salz gehalten.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Im ersten Halbjahr 2014 werden die geplanten gesteinsmechanischen Laborversuche am Probenmaterial „argillaceous salt“ sowie die Prüfkörperherstellung für die an der TU Clausthal geplanten Laborversuche abgeschlossen.

Außerdem sind weitere Verbesserungen bei der Nachrechnung der Laborversuche mit dem visko-elasto-plastischen Stoffmodell geplant.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Aktuelle Literatur zu den IfG-Stoffgesetzen:

HAMPEL, A., ARGÜELLO, J.G.; HANSEN, F.D., GÜNTHER, R.M., SALZER, K., MINKLEY, W., LUX, K.-H., HERCHEN, K., DÜSTERLOH, U., PUDEWILLS, A., YILDIRIM, S., STAUDTMEISTER, K., ROKAHR, R., ZAPF, D., GÄHRKEN, A., MISSAL, C. & STAHLMANN, J. (2013): Benchmark Calculations of the Thermo-Mechanical Behavior of Rock Salt – Results from a US-German Joint Project Presentation at the 47th US Rock Mechanics / Geomechanics Symposium held in San Francisco, CA, USA, 23-26 June 2013.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Hermann-von-Helmholtz-Platz 1, 76344 Eggenstein-Leopoldshafen		<b>Förderkennzeichen:</b>  <b>02 E 10840</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von Modellberechnungen zum thermo-mechanischen Verhalten und zur Verheilung von Steinsalz (TV3: KIT-INE)		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2010 bis 31.03.2016	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2013 bis 31.12.2013	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 302.359,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Pudewills	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Die Zusammenarbeit der Projektpartner Dr. Hampel, TU Clausthal, IfG Leipzig, KIT Karlsruhe, Universität Hannover und TU Braunschweig (FKZ 02E10810 bis 02E10860) hat das Ziel, Instrumentarien für die Nachweise zur sicheren und dauerhaften Untertage-Endlagerung von wärmeentwickelnden hochradioaktiven Abfällen in Steinsalzformationen zu verbessern. Als assoziierter Partner beteiligen sich die Sandia National Laboratories, Albuquerque (NM, USA).

Das Vorhaben setzt inhaltlich die beiden BMBF-Verbundprojekte "Die Modellierung des mechanischen Verhaltens von Steinsalz: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen" (Laufzeit: 01.04.2004 bis 30.11.2006) und "Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von 3D-Modellberechnungen zum mechanischen Langzeitverhalten von realen Untertagebauwerken im Steinsalz" (Laufzeit: 01.08.2007 bis 31.07.2010) fort.

In diesem BMWi-Verbundprojekt führt jeder Partner mit seinem Stoffgesetz und Programmsystem Benchmark-Modellberechnungen zur Spannungs-, Verformungs-, Dilatanz- und Schädigungsentwicklung in einer realen Untertagestruktur im Steinsalz durch. Im Vordergrund steht dabei nun das thermo-mechanische Verhalten und die Schädigungsrückbildung (Verheilung). Das Projekt dient einer realitätsnäheren Einschätzung der Stoffgesetzfähigkeiten im Hinblick auf deren Einsatz bei der praktischen Anwendung der Berechnung und Sicherheitsbewertung von Endlagern für wärmeentwickelnde Abfälle im Steinsalz.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Durchführung eines Start-Workshops
- AP2: Planung, Durchführung und Auswertung spezifischer Laborversuche
- AP3: Nachrechnung der Laborversuche, Bestimmung salztypspezifischer Kennwerte
- AP4: 3D-FDM/FEM-Modellierung der Untertagestrukturen, Auswertung der Ergebnisse
- AP5: Durchführung weiterer Workshops und Abstimmungen der Projektpartner
- AP6: Erstellung detaillierter Einzelberichte durch die Projektpartner
- AP7: Vergleich der Ergebnisse, Ausarbeitung von Schlussfolgerungen und Empfehlungen
- AP8: Durchführung einer öffentlichen Abschlussveranstaltung
- AP9: Erstellung des Abschlussberichts und Veröffentlichung der Projektergebnisse

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Die durchgeführten Arbeiten betrafen im Wesentlichen die folgenden Themen:

- Im zweiten Halbjahr 2013 wurden weitere Modellrechnungen der ausgewählten Laborversuche des Partners IfG-Leipzig und Verheilungsversuche der TU-Clausthal durchgeführt und die Ergebnisse auf dem 12. Und 13. Workshop in Hannover und Karlsruhe präsentiert und diskutiert.
- Nach der intensiven Besprechung über die Möglichkeiten einer gemeinsamen Darstellung der umfangreichen Rechenergebnisse zum „Dammjoch“ während des 11. Workshop, wurden neuere Simulationsrechnungen für das „Dammjoch-Problem“ durchgeführt bei dem das verwendete Gitternetz an eine gemeinsame Geometrie der Streckenkontur angepasst wurde. Diese Anpassung soll einen besseren Vergleich der von Verbundpartnern erhaltenen Ergebnisse (Konvergenz-, Dehnung-, Dilatanz-, Verheilung- und Spannungsentwicklung) erlauben. Dadurch wurde eine neue Darstellung der Rechenergebnisse notwendig, die ebenfalls fertig gestellt und teilweise an den Koordinator für eine Gegenüberstellung aller Ergebnisse der Partner weitergeleitet wurde.
- In den letzten zwei Monaten des Berichtszeitraums wurden außerdem die vorhandenen Veröffentlichungen zum Stoffverhalten des Steinsalzes aus der Waste Isolation Pilot Plant (WIPP) in New Mexico, USA ausgewertet und bereits mit neueren Festigkeit- und Kriech-Messdaten an WIPP-Salzproben („clean salt“ and „argillaceous salt“) verglichen.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Im ersten Halbjahr 2014 sollen zunächst weitere Modellrechnungen der ausgewählten Laborversuche durchgeführt und die Ergebnisse auf dem nächsten, für Ende Mai geplanten Workshop mit den Verbundpartnern diskutiert werden. Weiterhin sollen die vorhandenen Stoffmodelle angepasst werden, um die geplanten Benchmarkrechnungen der Untertagestrukturen „Room B“ und „Room D“ im WIPP zu simulieren.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Aktuelle Literatur zum Steinsalzstoffgesetz und zu den vorlaufenden Verbundprojekten:

Pudewills, A. (2011): Numerische Simulation zum mechanischen Langzeitverhalten eines realen Untertagebauwerks im Steinsalz, BMBF - Verbundprojekt 02C1597, Einzelbericht zum Teilprojekt 3, KIT Scientific Reports, KIT-SR 7579.

K. Salzer, R.-M. Günther, W. Minkley, T. Popp, M. Wiedemann, A. Hampel, A. Pudewills, B. Leuger, D. Zapf, R. Rokahr, K. Herchen, R. Wolters, U. Düsterloh: Joint projects on the comparison of constitutive models for the mechanical behavior of rock salt: I. Overview of the projects, reference mine for 3-D benchmark calculations, in-situ measurements and laboratory tests. In Proc. of the 7th Conf. on the Mechanical Behavior of Salt, Paris, France, 16-19 April 2012, P. Berest, M. Ghoreychi, F. Hadj-Hassen & M. Tijani, (eds), CRC Press, Taylor & Francis Group, London, UK.

Hampel, K. Salzer, R.-M. Günther, W. Minkley, A. Pudewills, B. Leuger, D. Zapf, R. Rokahr, K. Herchen, R. Wolters, U. Düsterloh: Joint projects on the comparison of constitutive models for the mechanical behavior of rock salt: II. Overview of the models and results of 3D benchmark calculations. In Proc. of the 7th Conf. on the Mechanical Behavior of Salt, Paris, France, 16-19 April 2012, P. Berest, M. Ghoreychi, F. Hadj-Hassen & M. Tijani, (eds.), CRC Press, Taylor & Francis Group, London, UK.

Hampel, A., L. Argüello, F. Hansen, R.-M. Günther, K. Salzer, K. Herchen, R. Wolters, U. Düsterloh, A. Pudewills, S. Yildirim, R. Rokahr, A. Gährken, C. Missal, J. Stahlmann: Benchmark Calculations of the Thermo-Mechanical Behavior of Rock Salt – Results from a US-German Joint Project, 2013. In Proceedings of Proceedings of the 47th US Rock Mechanics/Geomechanics Symposium 23-26 June 2013, San Francisco, ISBN: 978-0-894844-0-4.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Leibniz Universität Hannover, Welfengarten 1, 30167 Hannover		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10850</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von Modellberechnungen zum thermo-mechanischen Verhalten und zur Verheilung von Steinsalz (TV4: LUH-IUB)		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2010 bis 31.03.2016		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2013 bis 31.12.2013
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 391.592,00 EUR		<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Rokahr

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Die Zusammenarbeit der Projektpartner Dr. Hampel, TU Clausthal, IfG Leipzig, KIT Karlsruhe, Universität Hannover und TU Braunschweig (FKZ 02E10810 bis 02E10860) hat das Ziel, Instrumentarien für die Nachweise zur sicheren und dauerhaften Untertage-Endlagerung von wärmeentwickelnden hochradioaktiven Abfällen in Steinsalzformationen zu verbessern. Als assoziierter Partner beteiligen sich die Sandia National Laboratories, Albuquerque (NM, USA).

Das Vorhaben setzt inhaltlich die beiden BMBF-Verbundprojekte "Die Modellierung des mechanischen Verhaltens von Steinsalz: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen" (Laufzeit: 01.04.2004 bis 30.11.2006) und "Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von 3D-Modellberechnungen zum mechanischen Langzeitverhalten von realen Untertagebauwerken im Steinsalz" (Laufzeit: 01.08.2007 bis 31.07.2010) fort.

In diesem BMWi-Verbundprojekt führt jeder Partner mit seinem Stoffgesetz und Programmsystem Benchmark-Modellberechnungen zur Spannungs-, Verformungs-, Dilatanz- und Schädigungsentwicklung in einer realen Untertagestruktur im Steinsalz durch. Im Vordergrund steht dabei nun das thermo-mechanische Verhalten und die Schädigungsrückbildung (Verheilung). Das Projekt dient einer realitätsnäheren Einschätzung der Stoffgesetzfähigkeiten im Hinblick auf deren Einsatz bei der praktischen Anwendung der Berechnung und Sicherheitsbewertung von Endlagern für wärmeentwickelnde Abfälle im Steinsalz.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Durchführung eines Start-Workshops
- AP2: Planung, Durchführung und Auswertung spezifischer Laborversuche
- AP3: Nachrechnung der Laborversuche, Bestimmung salztypspezifischer Kennwerte
- AP4: 3D-FDM/FEM-Modellierung der Untertagestrukturen, Auswertung der Ergebnisse
- AP5: Durchführung weiterer Workshops und Abstimmungen der Projektpartner
- AP6: Erstellung detaillierter Einzelberichte durch die Projektpartner
- AP7: Vergleich der Ergebnisse, Ausarbeitung von Schlussfolgerungen und Empfehlungen
- AP8: Durchführung einer öffentlichen Abschlussveranstaltung
- AP9: Erstellung des Abschlussberichts und Veröffentlichung der Projektergebnisse

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Die Nachberechnungen des HPFC-Versuchs wurden abgeschlossen. Die projektspezifischen Kriech- und Festigkeitsversuche wurden ausgiebig analysiert und die Parameterbestimmung vorerst beendet. Neue Berechnungen für die Dammjoch-Simulation wurden durchgeführt. Weitere Auswertungs- und Vergleichsmethoden wurden mit den Projektpartnern besprochen und festgelegt. Die Implementierung des optimierten Stoffgesetzes Lubby-MDCF wurde fortgesetzt.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Weitere Berechnungsergebnisse aus den Dammjoch-Simulationsberechnungen sollen vorgestellt und mit den Projektpartnern diskutiert werden. Die Optimierung vom Stoffgesetz soll weiter fortgeführt werden. Das Berechnungsmodell zur WIPP-Site soll erstellt und die Simulationsberechnungen dazu vorbereitet werden. Mit den Nachberechnungen der projektspezifischen Versuche zur WIPP-Site soll begonnen werden.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Hauck, R. (2001): Tragverhalten tiefliegender Salzkavernen bei atmosphärischem Innendruck  
 Hampel, A., O. Schulze, U. Heemann, F. Zetsche, R.-M. Günther, K. Salzer, W. Minkley, Z. Hou, R. Wolters, U. Düsterloh, D. Zapf, R. Rokahr, A. Pudewills (2007): Die Modellierung des mechanischen Verhaltens von Steinsalz: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen. Abschlussbericht (Einzelberichte + Synthesebericht) z. BMBF-Verbundprojekt (FKZ 02C1004-1054), Forschungszentrum Karlsruhe GmbH, Projektträger PTKA-WTE.  
 Schulze, O., U. Heemann, F. Zetsche, A. Hampel, A. Pudewills, R.-M. Günther, W. Minkley, K. Salzer, Z. Hou, R. Wolters, R. Rokahr & D. Zapf (2007): Comparison of advanced constitutive models for the mechanical behavior of rock salt - results from a joint research project, I. Modeling of deformation processes and benchmark calculations.  
 Hou, Z., R. Wolters, U. Düsterloh, R. Rokahr, D. Zapf, K. Salzer, R.-M. Günther, W. Minkley, A. Pudewills, U. Heemann, O. Schulze, F. Zetsche & A. Hampel (2007): Comparison of advanced constitutive models for the mechanical behavior of rock salt - results from a joint research project, II. Numerical modeling of two in situ case studies and comparison.  
 Leuger, B., Staudtmeister, K., Yildirim, S., Zapf, D. (2010): Modeling of creep mechanism and damage of rock salt. Proceedings of the 7th european conference on numerical methods in geotechnical engineering, T. Benz, St. Nordal, London, UK, S. 89-94.  
 Hampel, A., R.-M. Günther, K. Salzer, W. Minkley, A. Pudewills, B. Leuger, D. Zapf, R. Rokahr, K. Herchen, R. Wolters, U. Düsterloh (2010): Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von 3D-Modellberechnungen zum mechanischen Langzeitverhalten von realen Untertagebauwerken im Steinsalz. Abschlussbericht (Einzelberichte + Synthesebericht) z. BMBF-Verbundprojekt (FKZ 02C1577-1617), Karlsruher Institut für Technologie, Projektträger PTKA-WTE.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Technische Universität Carolo-Wilhelmina zu Braunschweig, Pockelsstr. 14, 38106 Braunschweig		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10860</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von Modellberechnungen zum thermo-mechanischen Verhalten und zur Verheilung von Steinsalz (TV6: TUBS)		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2010 bis 31.03.2016	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2013 bis 31.12.2013	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 405.066,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Stahlmann	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Die Zusammenarbeit der Projektpartner Dr. Hampel, TU Clausthal, IfG Leipzig, KIT Karlsruhe, Universität Hannover und TU Braunschweig (FKZ 02E10810 bis 02E10860) hat das Ziel, Instrumentarien für die Nachweise zur sicheren und dauerhaften Untertage-Endlagerung von wärmeentwickelnden hochradioaktiven Abfällen in Steinsalzformationen zu verbessern. Als assoziierter Partner beteiligen sich die Sandia National Laboratories, Albuquerque (NM, USA).

Das Vorhaben setzt inhaltlich die beiden BMBF-Verbundprojekte "Die Modellierung des mechanischen Verhaltens von Steinsalz: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen" (Laufzeit: 01.04.2004 bis 30.11.2006) und "Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von 3D-Modellberechnungen zum mechanischen Langzeitverhalten von realen Untertagebauwerken im Steinsalz" (Laufzeit: 01.08.2007 bis 31.07.2010) fort.

In diesem BMWi-Verbundprojekt führt jeder Partner mit seinem Stoffgesetz und Programmsystem Benchmark-Modellberechnungen zur Spannungs-, Verformungs-, Dilatanz- und Schädigungsentwicklung in einer realen Untertagestruktur im Steinsalz durch. Im Vordergrund steht dabei nun das thermo-mechanische Verhalten und die Schädigungsrückbildung (Verheilung). Das Projekt dient einer realitätsnäheren Einschätzung der Stoffgesetzmöglichkeiten im Hinblick auf deren Einsatz bei der praktischen Anwendung der Berechnung und Sicherheitsbewertung von Endlagern für wärmeentwickelnde Abfälle im Steinsalz.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Durchführung eines Start-Workshops
- AP2: Planung, Durchführung und Auswertung spezifischer Laborversuche
- AP3: Nachrechnung der Laborversuche, Bestimmung salztypspezifischer Kennwerte
- AP4: 3D-FDM/FEM-Modellierung der Untertagestrukturen, Auswertung der Ergebnisse
- AP5: Durchführung weiterer Workshops und Abstimmungen der Projektpartner
- AP6: Erstellung detaillierter Einzelberichte durch die Projektpartner
- AP7: Vergleich der Ergebnisse, Ausarbeitung von Schlussfolgerungen und Empfehlungen
- AP8: Durchführung einer öffentlichen Abschlussveranstaltung
- AP9: Erstellung des Abschlussberichts und Veröffentlichung der Projektergebnisse



### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Der Zuwendungsempfänger beteiligt sich an dem Stoffgesetzvergleich im Teilvorhaben 6 mit dem Stoffgesetz für Steinsalz IGB-TUBS (Döring) und verwendet für die Modellberechnungen der Untertagestrukturen zurzeit das Finite-Differenzen-Programm FLAC3D in der Version 5.0 der Firma Itasca sowie das Finite-Elemente-Programm ANSYS in der Version 13.

Am 04. und 05. September fand der 10. Workshop zum Stoffgesetzvergleich in Hannover statt, bei dem Ergebnisse von Verheilungsversuchen sowie zu Nachrechnungen des Dammjochs gezeigt wurden. Bei beiden Fragestellungen treten noch Probleme auf, die weiterhin untersucht werden müssen.

Am 16. September fand in Leipzig ein Vorbereitungstreffen für den 4. US-German Workshop statt, bei dem die von den teilnehmenden Projektpartnern zu präsentierenden Ergebnisse diskutiert wurden.

Im Programmsystem ANSYS wurde das Modell für die Nachrechnungen der Versuche aus dem COSA II Report (IFC und HFCP) verbessert. Die Berechnung erfolgt nun durch die Entwicklung einer eigenen Zeitschrittsteuerung sowie eine bessere Ausnutzung der Hardware wesentlich schneller, was eine Simulation der kompletten Versuchslaufzeit erlaubt.

Im Berichtszeitraum wurden verschiedene Ansätze zur besseren Abbildung der Entstehung und des Einflusses der Volumendehnung überprüft, die aber bisher noch kein zufriedenstellendes Ergebnis liefern. Ebenso ist der Einfluss der Belastungsgeschwindigkeit auf die Entwicklung von Spannung und Volumendehnung in Festigkeitsversuchen noch nicht endgültig geklärt.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Die Berechnungen der Versuche aus dem COSA II Report in ANSYS müssen noch weiter optimiert werden, zusätzlich beginnt die Modellerstellung für die Berechnung des Dammjochs. In FLAC3D laufen weiterhin die Arbeiten an der Berechnung und Auswertung des Dammjochs.

Es ist mit den Ergebnissen der Laborversuche am WIPP-Salz zu rechnen, für deren Nachrechnung die Parameter des Stoffgesetzes entsprechend angepasst werden müssen.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Stahlmann, J.; Missal, C. (2010): Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von Modellberechnungen zum thermo-mechanischen Verhalten und zur Verheilung von Steinsalz. Poster. 31. Baugrundtagung 3. bis 6. November 2010, München

Hampel, A.; Argüello, J.G.; Hansen, F.D.; Günther, R.M.; Salzer, K.; Minkley, W.; Lux, K.-H.; Herchen, K.; Düsterloh, U.; Pudewills, A.; Yildirim, S.; Staudtmeister, K.; Rokahr, R.; Zapf, D.; Gärken, A.; Missal, C.; Stahlmann, J. (2013): Benchmark Calculations of the Thermo-Mechanical Behavior of Rock Salt – Results from a US-German Joint Project. 47th US Rock Mechanics/Geomechanics Symposium, 23.-26.06.2013, San Francisco, CA, USA

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Technische Universität Bergakademie Freiberg, Akademiestr. 6, 09599 Freiberg		<b>Förderkennzeichen:</b>  <b>02 E 10880</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Zusammenhang von Chemismus und mechanische Eigenschaften des MgO-Baustoffs		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Endlagersystem		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.12.2010 bis 30.09.2014	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2013 bis 31.12.2013	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 519.570,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Voigt	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Mit diesem Forschungsvorhabens sollen die Wissenslücken im Bereich des MgO-Baustoffs als potentielles, langzeitstabiles Material zur Errichtung von geotechnischen Barrieren im Salinar geschlossen werden. Ein geschlossenes Gesamtbild zu den kausalen Zusammenhängen zwischen Bindemittelphasenbildung und mechanischen Eigenschaften soll erarbeitet werden. Dazu gehört die Klassifizierung von MgO-Typen für entsprechende Auswahlkriterien für den Einsatz je nach Anforderung an den Baustoff.

Es werden die temperaturabhängigen Phasengleichgewichte (=Bindemittelphase) im Grundsystem MgO-MgCl<sub>2</sub>-H<sub>2</sub>O von 25 °C bis 120 °C bestimmt. Damit soll die eindeutige Identifikation der beim Abbinden des Sorelsystems entstehenden Phasen im Zusammenhang mit den jeweiligen Bildungsbedingungen und den sich daraus entwickelnden mechanischen Eigenschaften möglich sein. Der Zusammenhang zwischen Phasenbildung, technologischer Verarbeitbarkeit, möglicher Entwicklung eines Expansionsdruckes und Endfestigkeit soll dabei sichtbar gemacht werden.

Über das Grundsystem hinaus werden für reale Baustoffsysteme die Untersuchungen auf das System MgO-CaCl<sub>2</sub>/MgCl<sub>2</sub>-H<sub>2</sub>O und MgO-MgSO<sub>4</sub>-H<sub>2</sub>O erweitert. Für das System MgO-MgSO<sub>4</sub>-H<sub>2</sub>O sollen die temperaturabhängigen Phasengleichgewichte bestimmt werden, um in Kombination mit dem Grundsystem auf mögliche Mischphasen im Bindersystem unter Einfluss von Sulfat-haltigen Lösungen schließen zu können. Aus den gewonnen temperaturabhängigen Löslichkeitsdaten der genannten Systeme können Parameter abgeleitet werden, welche thermodynamische und geochemische Modellierungen der Wechselwirkungen mit den Komponenten des hexären Systems der ozeanischen Salze für übergreifende Anwendungen ermöglichen.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Phasenbildung im Grundsystem MgO-MgCl<sub>2</sub>-H<sub>2</sub>O bei erhöhten Temperaturen (40 °C, 60 °C, 80 °C, 100 °C, 120 °C)
- AP2: Einfluss von Sulfat und Natriumchlorid auf die Sorelphasenbildung
- AP3: Schlussfolgerungen für die Rezepturentwicklung
- AP4: Expansionsdruck von Sorelphasen
- AP5: Vorschlag für In-situ-Versuch

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1:

Die experimentelle Bestimmung von Löslichkeitsdaten im System  $\text{Mg}(\text{OH})_2\text{-MgCl}_2\text{-H}_2\text{O}$  wurde abgeschlossen (Isothermen für 25 °C, 40 °C, 60 °C, 80 °C, 100 °C und 120 °C).

AP2:

Die Ermittlung von Löslichkeitsdaten im System  $\text{Mg}(\text{OH})_2\text{-MgSO}_4\text{-H}_2\text{O}$  wurde abgeschlossen (Isothermen für 25 °C, 40 °C, 60 °C, 80 °C, 100 °C und 120 °C).

Lösegleichgewicht (25 °C-Isotherme) im System  $\text{Mg}(\text{OH})_2\text{-MgCl}_2\text{-NaCl-H}_2\text{O}$  wurde bestimmt. Bei NaCl-Sättigung weitet sich das Stabilitätsgebiet der 3-1-8 Phase zu  $\text{MgCl}_2$ -ärmeren Lösungskonzentrationen hin aus (stabil ab ca. 0,5 mol  $\text{MgCl}_2/\text{kg H}_2\text{O}$  bis hin zur Sättigungskonzentration an  $\text{MgCl}_2$ ).

AP3/AP4:

Messung des Druckverhaltens der Spritzbetonrezeptur mit 5-1-8 Phase aus dem abgeschlossenen Vorhaben „CARLA“, GV2, unter der Randbedingung des in-situ registrierten Abbinde-temperatur-Zeit-Profiles ( $T_{\text{max}} = 40 \text{ °C}$ ) mit korrelierender Bestimmung der Phasenbestandsentwicklung. Die Baustoffrezeptur erweist sich als volumenstabil, auch nach 6 Monaten im Anschluss an die Verarbeitung/das Abbinden ist keine Druckveränderung zu verzeichnen. Die unmittelbar mit dem Abbinden sich gebildete 5-1-8 Phase liegt unveränderlich über den gemessenen Zeitraum vor und es ist auch mit keinen Veränderungen zu rechnen, da das Gefüge keinerlei Porenlösung enthält.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Verwertung kalorimetrischer Messdaten.

AP3/AP4:

Ermittlung mechanischer Parameter der Spritzbetonrezeptur (5-1-8 Phase), abgebunden im entsprechenden Temperaturzeitfenster mit  $T_{\text{max.}} = 40 \text{ °C}$  am IfG (Auftrag an Dritte) sowie Beginn der Messung der Druckentwicklung bei sekundärem Lösungszutritt. Nach Abschluss der Messungen ist eine Analyse des Phasenbestandes des Baustoffkörpers geplant.

Analyse von drucklos in Lösung gelagerten Probekörpern (entnommen zu verschiedenen Zeiten aus den unterschiedlichen Abbinde-temperatur-Zeitfenstern).

Beginn der Berichtserfassung.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

„ $3\text{Mg}(\text{OH})_2\cdot\text{MgSO}_4\cdot 8\text{H}_2\text{O}$ : A Metastable Phase in the System  $\text{Mg}(\text{OH})_2\text{-MgSO}_4\text{-H}_2\text{O}$ “, Robert E. Dinnebier, Melanie Pannach and Daniela Freyer; *Z. Anorg. Allg. Chem.* 2013, 639, (10), 1827–1833

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10890</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Virtuelles Untertagelabor im Steinsalz - VIRTUS		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Endlagersystem		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.11.2010 bis 30.04.2014	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2013 bis 31.12.2013	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 1.861.233,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Wieczorek	

### 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Mit dem Projekt VIRTUS soll den an Endlagerprojekten in Deutschland beteiligten Institutionen ein leistungsstarkes Instrument zur Planung und Prüfung von Endlagerkonfigurationen in Steinsalzformationen bereitgestellt werden. Zu diesem Zweck bietet das Programmpaket innovative Werkzeuge zur Simulation, Visualisierung und wissenschaftlichen Bewertung der komplexen, untereinander gekoppelten Prozessabläufe in einem Untertagelabor bzw. Endlager. Die Erfassung und Auswertung der aus 30 Jahren Endlagerforschung vorhandenen Primärliteratur und die darauf aufbauende Entwicklung einer konsolidierten und qualitätsgesicherten Datenbasis für numerische Simulationen ist ein weiteres wesentliches Ziel im Projekt VIRTUS. Das Projekt leistet somit einen Beitrag zum Erhalt bzw. zur Dokumentation der in vielen Jahren der Untertageforschung erzielten wissenschaftlichen und technischen Ergebnisse und Erfahrungen. Insgesamt sollen die Erkenntnisse bei der zeitnahen Entwicklung eines fundierten Sicherheitsnachweises nach der Entscheidung für einen Standort eines HAW-Endlagers in einer salinaren Formation helfen.

Das Vorhaben wird als Gemeinschaftsprojekt von GRS (Projektleitung), BGR und DBE TEC durchgeführt, die Softwareentwicklung übernimmt IFF als Unterauftragnehmer der GRS.

### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Entwicklung der Softwareplattform für ein Virtuelles Untertagelabor/Endlagersystem im Steinsalz (GRS (IFF), BGR, DBETEC)
- AP2: Erstellung, Dokumentation und Pflege der VIRTUS-Datenbank(en) mit Auswertung der vorhandenen Primärliteratur und Erzeugung einer konsolidierten und qualitätsgesicherten Datenbasis für PLC-Simulationen (GRS (IFF), BGR, DBETEC)
- AP3: Service-orientierte Architektur (GRS (IFF) in Abstimmung mit BGR, DBETEC)
- AP4: Erarbeitung und Modifizierung des geologischen Standortmodells (BGR)
- AP5: Prototypische THMC-Modellierung ausgewählter Experimente zur Strecken- und Bohrlochlagerung bzw. entsprechender HAW-Endlagerkonfigurationen (GRS, BGR, DBETEC)
- AP6: Abschlussbericht und VIRTUS-Präsentation in einer Fachveranstaltung (GRS (IFF), BGR, DBETEC)

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1:

Im Bereich der Entwicklungen zur VIRTUS Softwareplattform wurden die Methoden zur Modellierung von Grubengebäuden und Einlagerungsbereichen um die Option, den Grad der Detaillierung der erzeugten Geometrie in Bezug auf den Querschnitt der Bohrlöcher, Einlagerungen und Streckenprofile

vorzugeben, erweitert. Die resultierenden Geometrien aus dem modellierten Grubengebäude wurden geometrisch optimiert, so dass qualitativ bessere Drei- und Vierecke erzeugt werden, die für die spätere Weiterverwendung des Gesamtnetzes notwendig sind. Die Algorithmen zur Validierung, Vereinfachung und Regularisierung der Dreiecksoberflächen der geologischen Modelle wurden weiter optimiert. Das VIRTUS Binärformat zur einheitlichen Übergabe der Ergebnisse von PLC-Simulationen an die VIRTUS Plattform wurde im Berichtszeitraum implementiert. Die Verarbeitung von Ergebnisdatensätzen wurde um Datensätze, deren Werte an Gausspunkten liegen, ergänzt. Weiterhin wurde die Möglichkeit geschaffen, vektorielle Datensätze als Vektorfeld in verschiedenen Schnittebenen visualisieren zu lassen.

AP2:

Der in Access entwickelte Prototyp der THM-Datenbank wurde in ein XML basiertes Datenbanksystem migriert. Für die Eingabe und Pflege der migrierten bzw. neuer Datensätze wurde ein intuitives Userinterface entworfen und implementiert. Im Rahmen der Literaturlauswertung wurden für Salzgesteine und technische Materialien inklusive Salzgrus die Themenbereiche Dichte, thermische Parameter und hydraulische Parameter abgeschlossen. Der Themenbereich mechanische Parameter ist zurzeit noch in Bearbeitung.

AP3:

Die VIRTUS Plattform wurde in Form einer service-orientierten Architektur umgesetzt. Alle Komponenten des Servers sowie deren Einbindung in die Clientsoftware wurden implementiert und befinden sich momentan in der Testphase. Zur effizienten Kommunikation und Bearbeitung von Programmfehlern verfügt der VIRTUS Server über ein Bug Tracking System.

AP5:

Zur prototypischen Modellierung wurden drei Experimente definiert, um damit die VIRTUS-Funktionen zur Visualisierung von Simulationsergebnissen zu demonstrieren. Jeder der Projektpartner übernimmt dabei die Modellierung eines Experiments. Zurzeit werden die Modelle für die Simulationsrechnungen erstellt.

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

- Implementierung des Hot Spot Konzepts
- Umsetzung der THM & Literaturdatenbank
- Beendung der Literaturlauswertung und Auffüllen der THM-Datenbank
- Simulation der definierten Experimente unter Einhaltung des Workflows
  - Ausschneiden des Experimentbereichs aus dem geologischen/geometrischen Modell
  - Aufbereitung und Export an den jeweiligen PLC
  - Export der benötigten THM-Daten an den PLC
  - FE-Netzgenerierung und PLC-Simulation (außerhalb VIRTUS)
  - Import der Ergebnisdaten
- Visualisierung von Vektor- und Tensor-Ergebnisdaten
- Fertigstellung der Servicearchitektur
- Einrichtung eines web-basierten Systemzugangs
- VIRTUS Präsentation und Abschlussbericht

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

Wieczorek, K., S. Masik, M. Raab, J. Behlau, M. Jobmann: The virtual underground research laboratory, Nuclear Engineering International, July 2013.

Wieczorek, K., J. Behlau, C. Müller, S. Masik: Modelling and Visualizing Coupled THM Processes in a Virtual Underground Laboratory – The VIRTUS Demonstrator, Poster EUROSAFE 2013, Köln, 4.-5. November 2013.

<b>Auftragnehmer:</b> DBE Technology GmbH, Eschenstr. 55, 31224 Peine	<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10900</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Virtuelles Untertagelabor im Steinsalz - VIRTUS	
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Endlagersystem	
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.11.2010 bis 30.04.2014	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2013 bis 31.12.2013
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 243.324,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Jobmann

### 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Mit dem Projekt VIRTUS soll ein leistungsstarkes Instrument zur Simulation, Visualisierung und wissenschaftlichen Bewertung der komplexen, untereinander gekoppelten Prozessabläufe in einem Untertagelabor bzw. Endlager sowie zur Planung und Prüfung von Endlagerkonfigurationen in Steinsalzformationen den an Endlagerprojekten in Deutschland beteiligten Institutionen bereit gestellt werden.

Mit der Erfassung und Auswertung der aus 30 Jahren Endlagerforschung vorhandenen Primärliteratur und der Ableitung einer konsolidierten und qualitätsgesicherten Datenbasis für numerische Simulationen leistet das Projekt auch einen Beitrag zum Erhalt bzw. zur Dokumentation der in vielen Jahren der Untertageforschung erzielten wissenschaftlichen und technischen Ergebnisse und Erfahrungen und trägt damit insgesamt zur zeitnahen Entwicklung eines fundierten Safety Case nach der Entscheidung für einen Standort eines HAW-Endlagers in einer salinaren Formation bei.

### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Entwicklung der Softwareplattform für ein Virtuelles Untertagelabor/Endlagersystem im Steinsalz (GRS (IFF), BGR, DBETEC)
- AP2: Erstellung, Dokumentation und Pflege der VIRTUS-Datenbank(en) mit Auswertung der vorhandenen Primärliteratur und Erzeugung einer konsolidierten und qualitätsgesicherten Datenbasis für PLC-Simulationen (GRS (IFF), BGR, DBETEC)
- AP3: Service-orientierte Architektur (GRS (IFF) in Abstimmung mit BGR, DBETEC)
- AP4: Erarbeitung und Modifizierung des geologischen Standortmodells (nur BGR)
- AP5: Prototypische THMC-Modellierung ausgewählter Experimente zur Strecken- und Bohrlochlagerung bzw. entsprechender HAW-Endlagerkonfigurationen (GRS, BGR, DBETEC)
- AP6: Abschlussbericht und VIRTUS-Präsentation in einer Fachveranstaltung (GRS (IFF), BGR, DBETEC)

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP1.4: Im Berichtszeitraum wurde weiterhin an der Umsetzung des 2011 erarbeiteten technischen Konzeptes gearbeitet. Dies betrifft vor allem die Überprüfung und Korrektur der verschiedenen VIRTUS-Softwareversionen und eine entsprechende Weiterentwicklung. Die Schwerpunkte lagen in den Bereichen Qualität und Konsistenz geologischer Modelle,

Erweiterung der Methoden zur Modellierung von Grubengebäuden und Einlagerungsstrecken, Integration verschiedener Schnittstellen zum Austausch zwischen den ProcessLevelCodes (PLCs) und VIRTUS sowie Implementierung von Algorithmen zur Visualisierung der Ergebnisdaten aus den PLCs.

- AP2: Das AP sieht die Erstellung einer VIRTUS-Datenbank vor, die Informationen über wichtige Modellierungsparameter enthält und somit als Datenbasis für PLC-Simulationen dienen soll. Ein erstes Ziel ist die Sichtung und Auswertung der vorhandenen Primärliteratur. Für Salzgesteine und technische Materialien (inklusive Salzgrus) wurden im Rahmen der Literaturobenauswertung die Themenbereiche Dichte, thermische Parameter und hydraulische Parameter abgeschlossen und die Ergebnisse in entsprechenden Protokollen dokumentiert. Die Protokolle enthalten Empfehlungen über Werte und Funktionen entsprechender Modellierungsparameter. Die Daten müssen anschließend an ein im Rahmen von VIRTUS entwickeltes XML-Datenbanksystem übergeben werden. Die Struktur eines entsprechenden Userinterfaces wurde in Diskussionsrunden entworfen und festgelegt.
- AP5: Im Berichtszeitraum wurde weiterhin an der Umsetzung prototypischer Experimente zur Strecken- und Bohrlochlagerung gearbeitet, um den Funktionsumfang von VIRTUS in einem Workflow zu demonstrieren. Die Modellierungen der DBE TECHNOLOGY GmbH umfassen die thermische Berechnung eines Feldes von Einlagerungsbohrlöchern zur Illustration der Wärmeausbreitung. Eine entsprechende Aufbereitung der geologischen Modelle in VIRTUS und Transfer der Modelle nach ANSYS konnte noch nicht vollständig automatisiert werden. Partiiell gibt es noch Probleme bei der Vernetzung in ANSYS mit den aus VIRTUS exportierten Modellen aufgrund ungünstiger Dreiecke. Mit den neu implementierten Korrekturmaßnahmen soll nun eine manuelle Nacharbeitung der Modell-dreiecksflächen erfolgen.

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

- Weiterführende Überprüfung der verschiedenen VIRTUS-Softwareversionen zur Sicherung der Qualität und Konsistenz geologischer Modelle.
- Weiterführende Literaturobenauswertung; Überprüfung des Datenbanksystems mit anschließender Dateneingabe nach Bereitstellung der finalen Datenbank.
- Durchführung der mit den Projektpartnern vereinbarten Experimente zur Demonstration eines kompletten Workflows mit VIRTUS und den PLCs.

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

Wieczorek, K., Masik, S., Raab, Behlau, J., Jobmann, M: The virtual underground research laboratory, Nuclear Engineering Internation, July 2013.

Wieczorek, K., J. Behlau, C. Müller, S. Masik: Modelling and Visualizing Coupled THM Processes in a Virtual Under-ground Laboratory – The VIRTUS Demonstrator, Poster EUROSAFE 2013, Köln, 4.-5. November 2013.

In Vorbereitung: Wieczorek, K., S. Masik, J. Behlau, C. Müller: Virtual Underground Laboratory for Rock Salt – VIRTUS, WM2014 Conference, March 2 – 6, 2014, Phoenix, Arizona, USA.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR), Stilleweg 2, 30655 Hannover		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10910</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Virtuelles Untertagelabor im Steinsalz - VIRTUS		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Endlagersystem		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.11.2010 bis 30.04.2014	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2013 bis 31.12.2013	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 372.697,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Behlau	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Mit dem Projekt VIRTUS soll den an Endlagerprojekten in Deutschland beteiligten Institutionen ein leistungsstarkes Instrument zur Planung und Prüfung von Endlagerkonfigurationen in Steinsalzformationen bereitgestellt werden. Zu diesem Zweck bietet das Programmpaket innovative Werkzeuge zur Simulation, Visualisierung und wissenschaftlichen Bewertung der komplexen, untereinander gekoppelten Prozessabläufe in einem Untertagelabor bzw. Endlager. Die Erfassung und Auswertung der aus 30 Jahren Endlagerforschung vorhandenen Primärliteratur und die darauf aufbauende Entwicklung einer konsolidierten und qualitätsgesicherten Datenbasis für numerische Simulationen ist ein weiteres wesentliches Ziel im Projekt VIRTUS. Das Projekt leistet somit einen Beitrag zum Erhalt bzw. zur Dokumentation der in vielen Jahren der Untertageforschung erzielten wissenschaftlichen und technischen Ergebnisse und Erfahrungen. Insgesamt sollen die Erkenntnisse bei der zeitnahen Entwicklung eines fundierten Sicherheitsnachweises nach der Entscheidung für einen Standort eines HAW-Endlagers in einer salinaren Formation helfen.

Das Vorhaben wird als Gemeinschaftsprojekt von GRS (Projektleitung), BGR und DBE TEC durchgeführt, die Softwareentwicklung übernimmt IFF als Unterauftragnehmer der GRS.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Entwicklung der Softwareplattform für ein Virtuelles Untertagelabor/Endlagersystem im Steinsalz (GRS (IFF), BGR, DBETEC)
- AP2: Erstellung, Dokumentation und Pflege der VIRTUS-Datenbank(en) mit Auswertung der vorhandenen Primärliteratur und Erzeugung einer konsolidierten und qualitätsgesicherten Datenbasis für PLC-Simulationen (GRS (IFF), BGR, DBETEC)
- AP3: Service-orientierte Architektur (GRS (IFF) in Abstimmung mit BGR, DBETEC)
- AP4: Erarbeitung und Modifizierung des geologischen Standortmodells (nur BGR)
- AP5: Prototypische THMC-Modellierung ausgewählter Experimente zur Strecken- und Bohrlochlagerung bzw. entsprechender HAW-Endlagerkonfigurationen (GRS, BGR, DBETEC)
- AP6: Abschlussbericht und VIRTUS-Präsentation in einer Fachveranstaltung (GRS (IFF), BGR, DBETEC)



### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

#### AP1:

Das 2011 von BGR entworfene XML-Übergabeformat wurde (mit Ausnahme der noch nicht endgültig definierten Schnittstelle für die Materialparameter) programmtechnisch vollständig umgesetzt und überprüft.

Die XML-Ausgabe des IFF Magdeburg wurde in diesem Zusammenhang von BGR ebenfalls überprüft und vorhandene Fehler zurückgemeldet.

Das binäre Ausgabeformat für die Ergebnisse von Modellberechnungen (zur Ergebnisdarstellung in VIRTUS) wurde Ende 2013 fertiggestellt; eine vollständige Überprüfung steht noch aus.

Es wurde eine Nutzeroberfläche entworfen, die, ausgehend vom Hotspot-Konzept, den unmittelbaren Zugang zu allgemeinen Informationen, den vielfältigen Angaben und Visualisierungen an einem Hotspot sowie zu allen relevanten Stoffgesetzen und Materialparametern erlaubt.

#### AP4:

Ein valides geologisches openGEO-Modell wurde von BGR übergeben und dient als Grundlage für die drei prototypischen geomechanischen Modellierungen. Die von bicad, unabhängig von VIRTUS, in openGEO implementierte Durchdringungsprüfung, einem abgewandelten Verfahren nach Devillers & Guigue folgend, hat zu einem validen geologischen Modell geführt. Dieses kann von Vernetzern, wie z. B. TetGen, der in der BGR als Vernetzer für OpenGeoSys (ehem. Rockflow) eingesetzt wird, fehlerfrei eingelesen und vernetzt werden.

#### AP5:

Eine Version des verschnittenen Geologie- und Streckenmodells liegt seit Ende des Jahres 2013 vor. Die Erstellung eines funktionstüchtigen 3D-FE-Modells ist in Arbeit.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Implementierung des Hotspot Konzepts.
- Vervollständigung der THM & Literaturdatenbank.
- Simulation definierter Experimente unter Einhaltung des Workflows.
  - Ausschneiden des Experimentbereichs aus dem geologischen/geometrischen Modell.
  - Aufbereitung und Export an den jeweiligen PLC.
  - Export der benötigten THM-Daten an den PLC.
  - FE-Netzgenerierung und PLC-Simulation (außerhalb VIRTUS).
  - Import der Ergebnisdaten.
- Visualisierung von Tensor-Ergebnisdaten.
- Fertigstellung der Servicearchitektur (Projektmanagement, Administration).
- Einrichtung eines web-basierten Systemzugangs.
- VIRTUS-Präsentation und Abschlussbericht.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Wieczorek, K., S. Masik, M. Raab, J. Behlau, M. Jobmann: The virtual underground research laboratory, Nuclear Engineering International, July 2013.

Wieczorek, K., J. Behlau, C. Müller, S. Masik: Modelling and Visualizing Coupled THM Processes in a Virtual Underground Laboratory – The VIRTUS Demonstrator, Poster EU-ROSAFE 2013, Köln, 4.-5. November 2013.

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln	<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10941</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Erprobung und Weiterentwicklung moderner Methoden der Sensitivitätsanalyse im Hinblick auf den Sicherheitsnachweis für ein künftiges Endlager - MOSEL	
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung	
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.05.2011 bis 30.04.2014	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2013 bis 31.12.2013
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 852.100,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Becker

### 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Die Sensitivitätsanalyse stellt einen wesentlichen Bestandteil der Modellrechnungen zur Langzeitsicherheit eines Endlagers dar. Die dafür bislang eingesetzten Verfahren liefern bei komplexen Endlagermodellen jedoch nur bedingt aussagekräftige Ergebnisse. Moderne Methoden, die genauere und verlässlichere Informationen liefern können, sollen im Hinblick auf Endlagermodelle vergleichend getestet und ggf. gezielt angepasst werden. Am Ende des Vorhabens soll eine Vorgehensempfehlung zur Durchführung globaler Sensitivitätsanalysen bei Modellrechnungen zur Langzeitsicherheit von Endlagern in unterschiedlichen Wirtsformationen gegeben werden. Im Vorhaben kommen die parallel im Projekt ADEMOS entwickelten statistischen Programmkomponenten zum Einsatz. Bezüglich der Testfälle wird auf Modelle zurückgegriffen, die in den Projekten ISIBEL und GENESIS/ERATO entwickelt wurden bzw. werden.

### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP1: Methoden der globalen Sensitivitätsanalyse:

Es ist ein ausführlicher Überblick über die Methoden der globalen Sensitivitätsanalyse sowie die Verfahren zur Stichprobenziehung zu erarbeiten. Die Methoden werden klassifiziert und hinsichtlich ihrer Eignung für den Einsatz im Rahmen von Sicherheitsnachweisen für Endlager bewertet. Laufende Aktivitäten und Entwicklungen im internationalen Bereich werden verfolgt und ausgewertet.

AP2: Definition von Testfällen:

Es sind mehrere Testmodelle und -szenarien zu definieren, anhand derer die verschiedenen Methoden getestet und verglichen werden können. Es sollen vorrangig Modelle für Salz- und Tonformationen betrachtet werden.

AP3: Durchführung und Auswertung von Testrechnungen:

Die im AP1 identifizierten Methoden der Sensitivitätsanalyse werden auf die Testfälle angewandt, soweit dies nach theoretischen Überlegungen sinnvoll erscheint.

AP4: Anpassung von Methoden und Bereitstellung für die Anwendung:

Aufgrund von Ergebnissen der Arbeitspakete 1 und 3 werden diejenigen Methoden identifiziert und ggf. weiterentwickelt, die für die Anwendung bei der Analyse der Langzeitsicherheit von Endlagern besonders geeignet erscheinen.

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP3: Im Berichtszeitraum wurden die Untersuchungen mit dem Modellsystem für ein Endlager für schwach- und mittelaktive Abfälle im Salzgestein weitgehend abgeschlossen und ausgewertet. Dabei wurde sowohl das numerisch aufwändige SDP-Verfahren [Ratto et al. 2007], dem ein Metamodell-Ansatz zugrunde liegt, als auch das sehr einfache EASI-Verfahren [Plischke 2010] angewandt. Im Zusammenhang mit einem Niedrigdiskrepanz-Ziehungsverfahren (LpTau) erwiesen sich diese Verfahren gegenüber früher untersuchten, die an spezifi-

sche Ziehungsverfahren gebunden sind, (FAST/EFAST, Sobol) als überlegen, da sie robustere Ergebnisse liefern. Interessanterweise liefern SDP und EASI bei identischen Stichproben nahezu dieselben Ergebnisse für die Sensitivitätsindizes 1. Ordnung, jedoch in sehr unterschiedlicher Rechenzeit. Während eine Analyse mit mehreren tausend Einzelrechenläufen mit SDP Stunden bis Tage benötigt, nimmt dieselbe Analyse mit EASI nur einige Minuten in Anspruch. Insofern kann EASI als das praxistauglichste der bisher getesteten Verfahren angesehen werden. Ein Nachteil ist jedoch, dass es keine Bestimmung von Sensitivitätsindizes höherer Ordnung erlaubt.

Es wurde festgestellt, dass einer der Modellparameter (die Magnesiumsättigung der Flüssigkeit im Endlager) offenbar die Sensitivitätsindizes der übrigen Parameter deutlich beeinflusst. Wird dieser Parameter auf einen Wert im unteren Bereich seiner Bandbreite fixiert, ergibt sich für die führenden Parameter eine andere Bedeutungsreihenfolge als wenn er über seine Bandbreite variiert oder auf den Erwartungswert fixiert wird. Dies ist insofern interessant, als keines der angewandten Verfahren für den Parameter selbst einen signifikanten Sensitivitätsindex geliefert hat. Aus einem niedrigen Sensitivitätsindex darf demnach nicht vorschnell auf die Bedeutungslosigkeit des Parameters bezüglich der Sensitivität des Systems geschlossen werden.

AP2: Als weiteres Testsystem wurde das Modell für ein Endlager für hochaktive Abfälle im Salzgestein aus dem Projekt ISIBEL übernommen und modifiziert. Mit diesem Modell sollen in erster Linie die Besonderheiten untersucht werden, die sich aus einer hohen Anzahl von Nullrechenläufen ergeben. Entsprechende Untersuchungen werden vornehmlich im Rahmen des Projekts NUMSA der TU Clausthal durchgeführt.

AP1: Zur Vorbereitung eines zukünftigen internationalen Projekts zum Thema „Umgang mit Unsicherheiten“ (IGD-TP JA8) wurde im Rahmen eines Abstimmungsgesprächs zunächst eine formlose Zusammenarbeit zum Themenbereich „Sensitivitätsanalyse“ zwischen den Organisationen GRS (D), TU Clausthal (D), Andra (F), Enresa (ES) und Sandia (USA) vereinbart.

AP4: Zur Bereitstellung eines neuen Werkzeuges zur Durchführung von Sensitivitätsanalysen ist ein Fremdauftrag geplant. Hierfür wurde ein geeigneter Auftragnehmer identifiziert, der Auftrag konnte jedoch noch nicht vergeben werden.

Ansonsten wurde im Berichtszeitraum an der vorläufigen Dokumentation der erzielten Ergebnisse gearbeitet. Das Projekt wurde mit einem Beitrag auf der SAMO 2013 (Nizza, 01.07. – 04.07.) sowie mit einem Poster auf der EUROSAFE 20123 (Köln, 04.11. – 05.11.) vorgestellt. Zwei Beiträge für die PSAM12 (Honolulu 22.06. – 27.06. 2014) sowie einer für die SIAM UQ14 (Savannah, 31.03. – 03.04. 2014) wurden angemeldet und akzeptiert.

Plischke, E.: An effective algorithm for computing global sensitivity indices (EASI). *Reliability Engineering and System Safety* 95 (2010) 354–360

Ratto, M. et al.: State Dependent Parameter metamodeling and sensitivity analysis. *Computer Physics Communications* 177 (2007) 863–876

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

Im verbleibenden Zeitraum sind im Wesentlichen Dokumentationsarbeiten durchzuführen. Dazu gehören auch die Ausarbeitung der genannten Tagungsbeiträge sowie eine Zeitschriftenveröffentlichung. Die Beiträge zur PSAM12 werden ebenfalls voll ausformuliert und einem Review-Prozess unterzogen.

Weiterhin sind einige numerische Experimente zur Handhabung von Parameterkorrelationen sowie insbesondere zur Verbesserung der Aussagen von Sensitivitätsanalysen durch Transformation des Modelloutputs geplant.

Der genannte Fremdauftrag soll erteilt und durchgeführt werden, sobald bestehende formale Unklarheiten auf Seiten des Auftragnehmers behoben sind.

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

Keine.

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10951</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Diffusion in kompaktiertem Salzgrus - DIKOSA		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.06.2011 bis 31.05.2014	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2013 bis 31.12.2013	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 588.400,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Flügge	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Im Projekt DIKOSA soll die Abhängigkeit des Porendiffusionskoeffizienten von der Porosität von Salzgrus experimentell mit Hilfe von sogenannten „through-diffusion“-Experimenten untersucht werden. Die Experimente werden zur Bestimmung der Gesetzmäßigkeit der Abhängigkeit bei unterschiedlicher Porosität des Salzgruses und mit unterschiedlichen Tracern durchgeführt. Die experimentell ermittelte Abhängigkeit soll in das Nahfeldmodul LOPOS für langzeitsicherheitsanalytische Rechnungen für Endlager im Salz implementiert und die Auswirkungen auf den Radionuklidtransport aus dem Endlager gezeigt werden. Dazu soll eine existierende sicherheitsanalytische Rechnung aus dem Projekt ISIBEL unter Berücksichtigung der verbesserten Beschreibung der Diffusion wiederholt werden.

Neben der direkten Bestimmung der Abhängigkeit des effektiven Porendiffusionskoeffizienten von der Porosität des Salzgruses lassen sich durch die durchgeführten Experimente auch Rückschlüsse auf die Struktur des Porenraumes im kompaktierten Salzgrus ziehen, wie z. B. auf dessen Porenraumvernetzung, d. h. auf das Vorhandensein oder Nichtvorhandensein von unverbundenen Poren. Diese Informationen liefern einen wichtigen Beitrag zur Klärung der Fragestellung, ob die Kompaktion von Salzgrus in den Zugangsstrecken des Endlagers das Transportpotenzial für Lösung und Schadstoffe im Salzgrus herabsetzt und eine potenzielle Freisetzung von Radionukliden verringert.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Planung, Durchführung und Auswertung der Diffusionsexperimente
- AP2: Integration der Ergebnisse in das langzeitsicherheitsanalytische Modell LOPOS (Implementierung in LOPOS und illustrative Rechnungen)
- AP3: Projektleitung und Dokumentation

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1:

- Die Ortsverteilung der Tracer im eingefärbten Probekörper wurde analysiert. Die Konzentrationen von Uran, Iod und Selen lagen zum großen Teil unter der Bestimmungsgrenze, während Zink und Neodym keinen einheitlichen Trend in der Ortsverteilung zeigen. Lediglich für Cäsium konnte eine Abnahme der Konzentration über die Länge des Kernes in zwei Profilen beobachtet werden. Die Vermutung, dass die Tracer an Eisenausfällungen an der Stirnseite des Probekörpers auf der Seite des Quellenreservoirs sorbiert worden sein könnten, konnte ebenfalls nicht bestätigt werden. Eine Erklärung für die aufgetretenen Probleme bei diesem Probekörper konnte somit nicht gefunden werden.
- Es wurden zwei weitere Salzgrusproben mit Porositäten von 1,94 % und 1,84 % zur Durchführung von Diffusionsversuchen kompaktiert, ihre Kennwerte ermittelt und die Gas- und Laugenpermeabilität bestimmt. Die Durchführung der Diffusionsversuche wurde am 22. August bzw. 24. September 2013 begonnen.
- Im ersten der beiden Versuche wurde als Tracer Cäsium in einer Konzentration von  $1 \cdot 10^{-2} \text{ mol l}^{-1}$  eingesetzt. Dieser Versuch wurde am 17.12.2013 abgebrochen, da kein nennenswerter Tracerdurchbruch im Senkenreservoir zu verzeichnen war. Ein anfänglicher Anstieg der Tracerkonzentration im Senkenreservoir fiel nach ca. 43 Tagen auf Konzentrationen nahe der Bestimmungsgrenze ab. Die Auswertung dieses Versuchs ergab keine realistischen Diffusionskoeffizienten.
- Für den zweiten der beiden Versuche wurden die Tracer Cäsium ( $1 \cdot 10^{-3} \text{ mol l}^{-1}$ ), Selenat ( $1 \cdot 10^{-3} \text{ mol l}^{-1}$ ), Iodid ( $1 \cdot 10^{-3} \text{ mol l}^{-1}$ ) und Neodym ( $5 \cdot 10^{-4} \text{ mol l}^{-1}$ ) eingesetzt. Nach ca. 10 Tagen war bereits ein Tracerdurchbruch zu beobachten. Erste vorläufige Auswertungen der Durchbruchkurven und Prognoserechnungen lassen eine Abschätzung der Größenordnung des Diffusionskoeffizienten von Cäsium, Selenat und Iodid zu.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

AP1:

- Weitere Analyse der Proben und Auswertung des laufenden Diffusionsversuchs
- Vorbereitung von zwei weiteren Salzgrusprobekörpern zur Durchführung von Diffusionsexperimenten mit Porositäten von ca. 4 %, danach Vorbereitung von Salzgrusprobekörpern mit höherer und niedrigerer Porosität
- Beginn von weiteren Diffusionsexperimenten an den neu hergestellten Probekörpern
- Auswertung der Versuche, ggf. Anpassung der Versuchsbedingungen

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Hermann-von-Helmholtz-Platz 1, 76344 Eggenstein-Leopoldshafen		<b>Förderkennzeichen:</b>  <b>02 E 10961</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im natürlichen Tongestein und in salinaren Systemen – Teilprojekt 1: Karlsruher Institut für Technologie		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.07.2011 bis 30.06.2014	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2013 bis 31.12.2013	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 674.049,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Marquardt	

### 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Untersucht werden relevante geochemische Aspekte der Rückhaltung von Np, Pu, Am und Cm im Tongestein. Die Schwerpunkte werden auf Untersuchungen der Sorption, Diffusion, Komplexierung und Redoxprozesse von Actiniden bei höheren Ionenstärken und Temperaturen liegen. Als Tongestein werden der natürliche Opalinuston, der natürliche Callovo-Oxfordian-Ton und das reine Tonmineral Illit untersucht. Zusätzlich werden Aspekte des Einflusses von mobiler Tonorganik und Behälterkorrosionsprodukten auf die Sorption und Diffusion einbezogen. Neben den Diffusionsversuchen mit Actiniden werden Diffusionsversuche mit Tonorganik durchgeführt. Daran gekoppelt sind Untersuchungen zur Stabilität von kolloidaler Tonorganik bei höheren Ionenstärken. Die Komplexierung von Np(V) mit niedermolekularen organischen Komponenten (LWOC) wird ebenfalls bei höheren Ionenstärken und höheren Temperaturen bis 90 °C untersucht. Weiterhin wird die Relevanz von Fe-Mineralphasen aus der Behälterkorrosion für eine Rückhaltung in einigen Sorptionsuntersuchungen geklärt werden. Zusammenarbeiten laufen mit dem Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf, der Universität Mainz, Potsdam, Heidelberg, Köln, Universität des Saarlandes sowie der TU München.

### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Sorptionsuntersuchungen: Cm(III)/Eu(III), Np(V), Pu(V) auf Opalinuston, Illite und Eisenphasen: Ionenstärkeabhängigkeit und Temperaturabhängigkeit, Einfluss von Tonorganik.
- AP2: Diffusionsuntersuchungen: Cm(III)/Eu(III) (eventuell Np(IV, V), Pu(IV, V)), <sup>3</sup>H-markierter Fulvinsäure mit kompaktiertem Illit.
- AP3: Komplexierungsuntersuchungen: Np(V) mit LWOC (Propionat, Lactat, Kerogen und Huminstoffen) bei höheren Ionenstärken (NaCl) und höheren Temperaturen.
- AP4: Redox-Untersuchungen: Redoxverhalten von Neptunium und Plutonium in NaCl-Lösungen
- AP5: Stabilität von Huminstoffkolloiden bei hohen Ionenstärken.
- AP6: Löslichkeitsuntersuchungen: Einfluss von Borat auf An(III)/Ln(III)-Löslichkeiten.
- AP7: Themen, die für das Projekt „THEREDA“ Datenlücken schließen.

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Diffusionsexperimente: Die Experimente zur Diffusion von tritium-markierter Fulvinsäure ( $^3\text{H-FA}$ ) in einem kompaktierten Na-Illit (IdP) wurden fortgesetzt, gemäß dem Aufbau von van Loon et al. (Hochkonzentrationsreservoir/Diffusionszelle/Niederkonzentrationsreservoir). Im Gegensatz dazu wurde das Volumen auf der Niederkonzentrationsseite von 25 mL auf 500 mL erhöht. Die Versuche wurden bei zwei Ionenstärken von 0.1 und 1 M NaCl und einem pH-Wert von 5, gepuffert mit 0.005M MES, durchgeführt. Die Proben wurden in regelmäßigen Abständen entnommen, und die Aktivitäten in beiden Kammern wurden durch Flüssigszintillationszählung bestimmt. Während der Versuchszeit erhöht sich die Aktivität in dem Niederkonzentrationsreservoir (NKR) allmählich, wobei sich die Konzentration in dem Hochkonzentrationsreservoir (HKR) erniedrigt. Nach etwa 70 Tagen wird ein stationärer Zustand (konstanter Fluss) erreicht. Der Durchbruch der  $^3\text{H-FA}$  in einem früheren Experiment wurde hiermit bestätigt. Die Abnahme der Aktivität in dem HKR sowie der Erhöhung der Aktivität im NKR liegen über 1 % der Anfangskonzentration in dem HKR. Damit sind die Randbedingungen nicht erfüllt, um die Diffusionsgleichung für ein Durchflussdiffusionsexperiment analytisch zu lösen und folglich können der effektive Diffusionskoeffizient ( $D_e$ ) und der „rock capacity factor“ ( $\alpha$ ) durch eine lineare Regressionsanalyse nur abgeschätzt werden. Als Resultat erhält man Diffusionskoeffizienten von  $D_e = 1.51 \times 10^{-11} \text{ m}^2/\text{s}$  und  $1.70 \times 10^{-11} \text{ m}^2/\text{s}$  und Kapazitätsfaktoren von  $\alpha = -0.44$  bzw. 0.61 für 0.1 und 1.0 M NaCl. Die abgeleiteten  $\alpha$ -Werte sind allerdings unrealistisch, wohingegen die Werte der Diffusionskoeffizienten vergleichbar sind mit dem  $D_e$ -Wert des negativ geladenen Chloridanions. Um zuverlässigere  $D_e$  und  $\alpha$ -Werte zu erhalten, werden die experimentellen Daten mittels numerischen (2-D)-Simulationen in naher Zukunft ausgewertet.

Stabilität von Huminstoffkolloiden bei hohen Ionenstärken: Die Stabilität von zwei aus Gorleben-Grundwasser extrahierten Fulvinsäuren (GoHy-FA-573 und 532) wurde in Lösungen mit erhöhten Salzkonzentrationen untersucht. Als Vergleich wurden ebenfalls charakterisiert eine synthetische Fulvinsäure (SFA, Universität Nantes, Frankreich), ein originales Gorleben-Grundwasser (GoHy-532) und ein Lignin-Derivat (Na-Lignosulfonat aus Zellulose). Die kolloidale Lösung der organischen Substanzen (OM: Organic Matter) wurden in NaCl,  $\text{CaCl}_2$ ,  $\text{MgCl}_2$ ,  $\text{FeCl}_3$  und HCl-Medien hergestellt mit Ionenstärken von 0.01 bis 5 M. Die Veränderung der kolloidalen Lösung - Größenvariation der OM - wurde untersucht mittels Absorptions-Spektroskopie kombiniert mit SEC (Größenausschluss-Chromatographie) und Zentrifugation kombiniert mit DOC-Analyse (Dissolved Organic Carbon). Die ersten Resultate zeigen, dass die OM in Lösung unter diesen Bedingungen recht stabil bleibt: bis 3 M NaCl wird kein nennenswerter Effekt beobachtet; in 5 M NaCl und 3 M  $\text{CaCl}_2$  oder  $\text{MgCl}_2$  werden nur geringe Mengen der OM durch Zentrifugation abgetrennt (kleiner 5 % DOC). Allerdings gibt es Hinweise aus den UV-Vis-Spektren auf eine konformative Änderung der Moleküle durch eine Größenänderung der Kolloide. Dieses Ergebnis konnte durch die SEC-Analyse qualitativ bestätigt werden. Die kolloidalen Lösungen werden nach 18 Monaten erneut charakterisiert. Basierend auf eine umfassendere Literaturstudie und verfeinerten mathematische Auswertungen der Absorptionsspektren, wird eine bessere Quantifizierung des destabilisierenden Effekts auf die organischen Kolloide erwartet.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Weiterführung der  $^3\text{H-FA}$  Diffusionsexperimente;  
 Endauswertung der Sorptionsexperimente von Np, Pu an Illit und OPA/ $\text{CO}_x$ -Ton;  
 Beginn der Untersuchungen zur Komplexbildung von Np(V) mit Propionat, Laktat und Fulvinsäure bei erhöhten Temperaturen.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e. V., Bautzner Landstr. 400, 01328 Dresden		<b>Förderkennzeichen:</b>  <b>02 E 10971</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im natürlichen Tongestein und in salinaren Systemen – Teilprojekt 2: Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.07.2011 bis 30.06.2014	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2013 bis 31.12.2013	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 1.117.537,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Schmeide	

### 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Ziel des Vorhabens sind Beiträge für zuverlässige Prognosen zur Ausbreitung endlagerrelevanter Radionuklide im natürlichen Tongestein und in salinaren Systemen in Abwesenheit und Gegenwart von Organika. Es sollen neue Erkenntnisse zum Einfluss von Ionenstärke, Salzmedium bzw. Temperatur auf das Komplexbildungs-, Redox-, Sorptions- und Diffusionsverhalten der Radionuklide im System Radionuklid/Tonorganika/ Tongestein/Aquifer erhalten werden. Diese Arbeiten zielen auf ein besseres Verständnis der ablaufenden Prozesse sowie auf eine Erweiterung der thermodynamischen Datenbasis und sollen zeigen, inwieweit die bisher in Gegenwart von Porenwässern geringerer Ionenstärke erhaltenen Erkenntnisse zum Migrationsverhalten von Radionukliden im natürlichen Tongestein auf potentielle Tonstandorte in Norddeutschland, deren Grund- und Porenwässer höhere Salinitäten aufweisen, übertragbar sind. Die Ergebnisse liefern somit einen Beitrag zur kontinuierlichen Verbesserung der Kenntnisse und des Instrumentariums zur Prognose der langfristigen Entwicklung untertägiger Entsorgungseinrichtungen. 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

- Untersuchung der Komplexbildung von Np, U und Pu in ausgewählten Oxidationsstufen mit endlagerrelevanten organischen Liganden in salinaren Lösungen
- Untersuchung der Stabilität von Huminstoff-Kolloiden in Abhängigkeit von der Ionenstärke ( $\text{Na}^+$ ,  $\text{Mg}^{2+}$ ,  $\text{Ca}^{2+}$ ) und vom pH-Wert
- Radiotracer-Untersuchungen zur Dynamik von Komplexbildungsgleichgewichten mit huminstoffartigen Liganden
- Untersuchung der Np(V)-Sorption aus salinaren Lösungen variierender Ionenstärke an synthetischen Behälterkorrosionsprodukten bei 25 °C
- Untersuchung der U(VI)-Sorption aus salinaren Lösungen variierender Ionenstärke an Tonmineralen und natürlichem Tongestein (Opalinuston). Quantifizierung des Einflusses von Tonorganika
- Untersuchung der U(VI)-Diffusion im Opalinuston bei erhöhter Ionenstärke bei 25 °C
- Ortsauflösende Untersuchung von Diffusionsprozessen in Tonen mittels Positronen-Emissions-Tomographie (PET)
- Untersuchung des Transports im gestörten Barrierengestein und der Auflockerungszone
- Untersuchung der Wechselwirkung von Actiniden/Lanthaniden mit Ton-Bakterien



### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- Die U(VI)-Propionat-Komplexierung wurde mittels UV/Vis-Spektroskopie (Kapillarzelle 250 cm Pfadlänge) in Abhängigkeit der Ionenstärke (1.5 – 4 mol/kg NaCl bzw. NaClO<sub>4</sub>) untersucht. Gegenwärtig erfolgt die Auswertung der Daten.
- Der Einfluss der Ionenstärke auf das Adsorptionsverhalten von höhermolekularen Tonorganika an Opalinuston wurde anhand von <sup>14</sup>C-markierter Fulvinsäure in Gegenwart von NaCl, MgCl<sub>2</sub> und CaCl<sub>2</sub> (bis 4 M) untersucht. Anders als bei Metallspezies wirken hohe Elektrolytgehalte auf org. Material adsorptionsfördernd, da abstoßende WW mit der gleichsinnig geladenen Mineraloberfläche abgeschirmt werden. Somit bewirken hohe Ionenstärken prinzipiell eine Verringerung des Mobilisierungspotentials von Tonorganika gegenüber Actiniden.
- U(VI)-Sorption an Montmorillonit in NaCl (I = 0,3/1/3 M) unter Ausschluss von CO<sub>2</sub>. Im sauren Bereich wurde ein Ionenstärkeinfluss festgestellt. Das Sorptionsmaximum liegt bei pH 7, geringfügige Abnahme der Sorption bei höheren pH-Werten. Die Sorptionsisotherme bei pH 5,3 und c = 2 M ergab die Freundlich-Koeffizienten  $\lg nF = 0,707 \pm 0,005$  (nichtlineares Verhalten) und  $\lg k_F = 1,50 \pm 0,04$  sowie  $\lg K_d = 3,72 \pm 0,06$ .
- U(VI)-Desorption von Montmorillonit in NaCl (0,1/0,6/3 M) und CaCl<sub>2</sub> (0,1/0,3 M), pH 5 – 7 und Anwesenheit von CO<sub>2</sub>. Im NaCl-System ist U(VI)-Sorption bei c = 0,1 u. 0,6 M voll reversibel, bei c = 3 M nur teilweise reversibel. Im CaCl<sub>2</sub>-System ist U(VI)-Sorption bei pH 5 voll reversibel, bei pH 6 und 7 teilweise reversibel.
- Untersuchung der WW des Ton-Isolates Paenibacillus sp. mit Pu(VI)+Pu(IV)-Polymeren bei pH 6 mit Elektronendonator. Verzögerte Anbindung (Abwehrmechanismus der Zellen?), erst ab ca. 400 h Kontaktzeit ist eine deutliche Zunahme des gebundenen Pu zu verzeichnen (Unterschied zu Sporomusa sp.).
- Analyse der TEM/EDX-Experimente von Eu(III) mit Sporomusa sp. Nachweis von Eu(III) (wahrscheinlich phosphatisch gebunden) in äußeren Bereichen der Zellmembran (metabolische Aktivität), auch extrazelluläre Eu(III)-Akkumulate nachgewiesen.
- Der Salz-Referenzstamm Halobacterium noricense A1 (DSM-15987) wurde kultiviert.
- Aus Opalinuston wurden Prüfkörper hergestellt und daran PET-Messungen zum Ausbreitungsverhalten von I-124 in synthetischem Opalinustonporenwasser durchgeführt.
- Mit F-18 markiertes Na-Wasserglas wurde unter PET-Beobachtung in einen mechanisch vorbelasteten Salinarbohrkern injiziert. Die Wirksamkeit der Vergütung wurde mittels Injektionsexperimenten mit gesättigter Salzlösung bewertet.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Untersuchung des Temperatureinflusses (bis 60 °C) auf U(VI)-Propionat-Komplexierung.
- Quantitative Untersuchungen zur Wechselwirkung von Na, Mg und Ca mit Fulvinsäure als Grundlage für Modellierungen. Exemplarische Studien zum Einfluss von Organik auf das 1D-Transportverhalten von <sup>160</sup>Tb in kompaktiertem Opalinuston bei hoher Ionenstärke.
- Sorption von U(VI) an Montmorillonit in CaCl<sub>2</sub> (I = 0,3/1/3 M, pH-abhängig) unter Ausschluss von CO<sub>2</sub>; spektroskopische Bestimmung der Oberflächenkomplexe und der im CaCl<sub>2</sub>-System gebildeten Sekundärphasen. U(VI)-Diffusion in kompaktiertem Montmorillonit.
- TRLFS-Untersuchungen mit Eu(III)/Cm(III) bei hohen Ionenstärken (NaCl); erste Messungen mit Salz-Referenzstamm.
- Weiterführende Diffusionsuntersuchungen mit [<sup>22</sup>Na]Na<sup>+</sup>.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

- Joseph, C., Stockmann, M., Schmeide, K., Sachs, S., Brendler, V., Bernhard, G.: Sorption of U(VI) onto Opalinus Clay: Effects of pH and humic acid. *Appl. Geochem.* 36, 104-117 (2013).
- Pietrzyk, U., Zakhnini, A., Axer, M., Sauerzapf, S., Benoit, D., Gaens, M.: EduGATE - basic examples for educative purpose using the GATE simulation platform. *Z. für Medizin. Physik* 23, 65-70 (2013).
- Raditzky, B., Sachs, S., Schmeide, K., Barkleit, A., Geipel, G., Bernhard, G.: Spectroscopic study of Am(III) complexes with nitrogen containing organic model ligands. *Polyhedron* 65, 244-251 (2013).
- Joseph, C.: The ternary system U(VI) / humic acid / Opalinus Clay. Dissertation, TU Dresden (2013).
- Zehlike, L.: Durchführung von Sorptions- und Desorptionsversuchen von U(VI) an Montmorillonit. Bachelorarbeit, TU Dresden (2013).

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Johannes Gutenberg-Universität Mainz, Saarstr. 21, 55122 Mainz		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10981</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im natürlichen Tongestein und in salinaren Systemen – Teilprojekt 3: Universität Mainz		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.07.2011 bis 30.06.2014	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2013 bis 31.12.2013	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 498.000,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Reich	

### 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Die Wechselwirkung von Np und Pu mit natürlichem Tongestein wird bei höheren Salinitäten als Funktion des pH-Wertes in An- und Abwesenheit von gelöstem Fe(II) untersucht. Für die Sorption von Np(V) an Montmorillonit werden Sorptionsisothermen bei hohen Ionenstärken gemessen und mit Berechnungen verglichen, die auf einem für niedrige Ionenstärken entwickelten Sorptionsmodell beruhen. Der Einfluss der Temperatur auf die Sorption und Diffusion bei hohen Salinitäten wird schwerpunktmäßig für das System Np-Ton untersucht. Darüber hinaus werden das Sorptionsverhalten und die Speziation von Tc in Tongestein studiert. Die Speziation von Np, Pu und Tc erfolgt mittels XPS, EXAFS/XANES in festen Proben und mit der CE-ICP-MS bzw. CE-RIMS in Lösungen. Diese Untersuchungen sollen die thermodynamische Datenbasis zum Verhalten von Np, Pu und Tc in einem Tongestein bei höherer Salinität erweitern und damit wichtige Informationen für die Modellierung des Langzeitverhaltens dieser Radioelemente in einem möglichen Endlager mit Ton als Wirtsgestein liefern. Im Rahmen des Verbundprojekts wird schwerpunktmäßig mit dem Institut für Ressourcenökologie des Helmholtz-Zentrums Dresden-Rossendorf, dem Institut für Nukleare Entsorgung des Karlsruher Instituts für Technologie, der Universität des Saarlandes und der TU München zusammengearbeitet.

### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- Batchexperimente zur Sorption von Np an Montmorillonit und von Np und Pu an natürlichem Tongestein bei höheren Salinitäten in Abhängigkeit des pH-Wertes
- Untersuchung des Einflusses von gelöstem Fe(II) auf das geochemische Verhalten von Np und Pu in natürlichem Tongestein
- Speziation von Np und Pu bei der Wechselwirkung mit natürlichem Tongestein unter hohen Salinitäten
- Diffusionsexperimente mit Np in natürlichem Tongestein bei höheren Salinitäten und Temperaturen von 25 und 60 °C
- Sorption und Speziation von Tc bei der Wechselwirkung mit natürlichem Tongestein.

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

In Batchexperimenten wurde die pH-Abhängigkeit der Sorption von  $4 \times 10^{-7}$  M Pu(III) an Opalinuston (OPA) in 0,1 M NaCl unter anaeroben Bedingungen untersucht. Zum Vergleich wurde eine Sorptionskurve von  $5 \times 10^{-7}$  M Am(III) unter aeroben Bedingungen gemessen. Beide pH-Kurven zeigen einen identischen Verlauf: Die pH-Kante (50 % Sorption) liegt bei pH 4,5. Ab pH 5 werden Pu(III) und Am(III) zu über 95 % an OPA sorbiert. Bei pH 4, wo der Kationenaustausch der dominierende Sorptionsmechanismus ist, wurde eine Abhängigkeit der Pu(III)-Sorption von der Ionenstärke beobachtet. So beträgt die Sorption von  $4 \times 10^{-7}$  M Pu(III) an OPA bei pH 4 in 0,01 M NaCl 60 %. Mit zunehmender Ionenstärke von 1-3 M NaCl sinkt die Sorption von Pu(III) auf ca. 20 %. Bei pH 7,6 konnte auf Grund der vollständigen Sorption keine Ionenstärkeabhängigkeit (0,01-3 M NaCl) festgestellt werden.

Um die Anwendbarkeit des Modells 2SPNE SC/CE für die Modellierung der Sorptionsdaten von Actiniden bei höheren Salinitäten zu untersuchen, wurden zunächst die Sorptionskurven von Pu(III)/Am(III) an Montmorillonit (STx-1) in 0,1 M NaCl gemessen. Der Verlauf der Sorption von Pu(III)/Am(III) an STx-1 lässt sich gut mit den von Bradbury und Baeyens (2005, 2006) erhaltenen Konstanten mit 0,1 M NaClO<sub>4</sub> als Hintergrundelektrolyt beschreiben. Nur bei der Konstante für den Kationenaustausch von Pu(III) kommt es zu einer Abweichung, die noch weiter untersucht werden muss. Die pH-Abhängigkeit der Sorption von Np(V) an Illit du Puy in 0,1 M NaCl lässt sich gut mit den für 0,1 M NaClO<sub>4</sub> publizierten Daten modellieren. Für das System Np(V)/STx-1 gibt es in den experimentellen Sorptionsverläufen im pH-Bereich von 6-9 eine deutliche Abweichung zwischen den in 0,1 M NaClO<sub>4</sub> und den in 0,1 M NaCl erhaltenen Daten, die vor einer Modellierung durch zusätzliche Experimente geklärt werden muss.

Bei der Diffusion von 8 µM Np(V) mit 0,1 M NaCl (pH 7,6) als mobile Phase bei 60 °C unter aeroben Bedingungen konnte nach 40 Tagen <sup>237</sup>Np-Aktivität bis zu einer Tiefe von 900 µm im OPA-Bohrkern nachgewiesen werden. Im Vergleich zu dem Diffusionsexperiment bei 25 °C erhöht sich der Diffusionsparameter  $D_e$  von  $(7 \pm 1) \times 10^{-12} \text{ m}^2/\text{s}$  auf  $(17 \pm 2) \times 10^{-12} \text{ m}^2/\text{s}$ . Die übrigen Diffusionsparameter zeigen keinen signifikanten Temperatureinfluss und betragen bei 60 °C:  $\varepsilon = 0,21 \pm 0,01$  und  $\alpha = 802 \pm 8$ .

In einer Messzeit an der Swiss Light Source konnte die Speziation von Np entlang seines Diffusionspfades nach unterschiedlichen Zeiten in einem OPA-Bohrkern mittels Np L<sub>3</sub>-Kante µ-XANES und µ-XRF studiert werden. Die Messungen zeigen, dass das eingesetzte Np(V) zunehmend zu Np(IV) reduziert wird, je weiter es in das Tongestein diffundiert.

#### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Untersuchung des Einflusses der Temperatur ( $\leq 80 \text{ °C}$ ) auf die Sorption von Np(V) an OPA bei unterschiedlichen Ionenstärken (0,1 - 3,0 M NaCl) unter aeroben Bedingungen.
- Abschluss der Batchexperimente zur pH- und Ionenstärkeabhängigkeit der Sorption von Np(V) an Montmorillonit (STx-1) in NaCl-Lösungen sowie Modellierung der erhaltenen Sorptionsdaten mit Hilfe des Modells 2SPNE SC/CE.
- Diffusionsexperimente mit Tc(VII) und Np(V) in OPA zur Absicherung der bisher ermittelten Parameter.
- XANES- und EXAFS-Messungen zur Sorption von Tc an OPA.

#### 5. Berichte, Veröffentlichungen

T. Billington, Einfluss der Salinität auf die Sorption von Np(V) an Montmorillonit unter Ausschluss von CO<sub>2</sub>, 2013 (Diplomarbeit).

U. Kaplan, Speziation von Plutonium bei der Sorption und Diffusion in Opalinuston, 2013 (Dissertation).

S. Amayri, U. Kaplan, J. Drebert, J. Rosemann, D. Grolimund, T. Reich, Speziation von Plutonium bei der Migration in Tongestein, Poster auf der Jahrestagung der GDCh-Fachgruppe Nuklearchemie, GDCh-Wissenschaftsforum Chemie 2013, 2.-4.9.2013, Darmstadt.

M. Lübke, S. Amayri, J. Drebert, T. Reich, Sorption of technetium after sorption and diffusion in Opalinus Clay, Poster auf der Jahrestagung der GDCh-Fachgruppe Nuklearchemie, GDCh-Wissenschaftsforum Chemie 2013, 2.-4.9.2013, Darmstadt.

S. Amayri, U. Kaplan, J. Drebert, J. Rosemann, D. Grolimund, T. Reich, Speciation of plutonium during diffusion in Opalinus Clay, Poster auf der MIGRATION 2013 Konferenz, 8.-13.9.2013, Brighton, UK.

T. Reich, S. Amayri, J. Drebert, D. R. Fröhlich, D. Grolimund, U. Kaplan, Speciation of neptunium uptake by Opalinus Clay, Vortrag auf der MIGRATION 2013 Konferenz, 8.-13.9.2013, Brighton, UK.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Universität des Saarlandes, Campus der Universität des Saarlandes, 66123 Saarbrücken		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10991</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im natürlichen Tongestein und in salinaren Systemen – Teilprojekt 4: Universität des Saarlandes		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.07.2011 bis 30.06.2014	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2013 bis 31.12.2013	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 583.573,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Kickelbick	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Ziel des Forschungsvorhabens ist die Untersuchung des geochemischen Verhaltens (Sorption bzw. Desorption, Migration sowie Komplexierung bzw. Kolloidbildung) von Uran (U(VI)) und Lanthaniden (Eu(III), Gd(III)) als deren Stellvertreter für dreiwertige Actiniden, vor allem unter dem Einfluss von Grundwasserbedingungen mit höheren Salinitäten in natürlichem Tongestein zu untersuchen. Hierbei wird auch der Einfluss von unterschiedlicher Tonorganik auf die Sorption bzw. Desorption von U(VI) und Lanthaniden berücksichtigt. Zusätzlich wird ein Teil dieser Untersuchungen bei höheren Temperaturen und höheren Ionenstärken durchgeführt, um die noch vorhandenen Datenlücken zu verringern. Ein zweiter Projektschwerpunkt beschäftigt sich mit dem Komplexierungsverhalten von Uran und Lanthaniden (Eu, Gd) mit organischen und anorganischen Komplexliganden (Tonorganik, Borat) im Übergang von wässrigen Lösungen auf salinare Systeme. Durch Anwendung neuer (NMR) bzw. Anpassung vorhandener Verfahren zur Metall-Speziation (CE- bzw. LC-ICP-MS) an salinare Systeme sollen insbesondere Komplexbildungskonstanten bei höherer Ionenstärke bestimmt werden. Die im Vorgängerprojekt entwickelten LC-Miniatur-Säulenversuche werden eingesetzt, um den Einfluss der Temperatur sowie anderer relevanter geochemischer Parameter auf die Mobilität der Metalle im kompakten Tongestein zu untersuchen.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Bestimmung der Einflüsse geochemischer Parameter (Metall-Konzentration, pH, Temperatur, Salinität) auf die Sorption von Eu(III), Gd(III) und U(VI) in Opalinuston mit Hilfe von Batch-Versuchen (binäres System)
- AP2: Bestimmung der Einflüsse geochemischer Parameter (Metall-Konzentration, pH, Temperatur, Salinität) auf die Desorption von Lanthanoiden und Radionukliden (Eu, Gd und U) in natürlichen Tonformationen mit Hilfe von Batch-Versuchen (binäres System)
- AP3: Bestimmung der Einflüsse von Tonorganik (Lactat, extrahierte Tonorganik bzw. Huminsäure) und anorganischer Komplexliganden (Borat) auf die Sorption von Lanthanoiden und Radionukliden (Eu, Gd und U) an Tongestein bei Grundwasserbedingungen mit hohen Salinitäten (ternäres System bei salinaren Bedingungen)
- AP4: Untersuchungen zum Komplexierungsverhalten von Uran und Lanthanoiden (Eu, Gd) mit organischen Komplexliganden (Lactat,  $^{13}\text{C}$ -Lactat, extrahierte Tonorganik und Aldrich-Huminsäure zum Vergleich mit vorhandenen Ergebnissen) und mit anorganischen Komplexliganden (Borat) im Übergang von wässrigen Lösungen auf salinare Systeme durch Speziation mittels  $^{11}\text{B}$  NMR,  $^{13}\text{C}$  NMR, CE- und LC-ICP-MS; Anpassung der vorhandenen Tools zur Metall-Speziation in salinaren Systemen
- AP5: Einfluss von unterschiedlicher Salinität sowie anorganischer Komplexliganden auf die Speziation der untersuchten Metalle mit Fulvin- bzw. Huminsäure (Metall-NOM-Komplexe) mit Hilfe der entwickelten Nachweis- und Speziations-Methoden und Vergleich mit der Speziation von Modellorganika (z. B. Lactat, bzw. Aldrich-Huminsäure)

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im Berichtszeitraum wurden Desorptionsuntersuchungen von Europium und Uran im ternären System durchgeführt. Die Untersuchungen wurden in 0,01 M NaClO<sub>4</sub> sowie in 1 und 3 M NaCl Lösung durchgeführt. Im Vergleich zu den Ergebnissen im binären System zeigt sich, dass die Aldrich Huminsäure zu einer stärkeren Metall-Desorption führt. Dieser Effekt ist bei allen drei Ionenstärken zu beobachten. Vergleicht man jedoch die Ionenstärken im ternären System miteinander, reduziert die erhöhte Ionenstärke den Effekt der Huminsäure. Dies kann damit zusammenhängen, dass die Huminsäure die Analyten in Gegenwart von Na<sup>+</sup> weniger mobilisieren kann, da der Überschuss an Na<sup>+</sup> zu einer partiellen Ausfällung der Huminsäure führt.

Neben den Desorptionsexperimenten wurden noch pH-edges im ternären System mit Aldrich-Huminsäure aufgenommen. Dabei konnte beobachtet werden, dass die Huminsäure, vor allem bei pH-Werten größer 6, zu einer Mobilisierung des Europiums führt. Dieser Einfluss ist nahezu unabhängig von der Ionenstärke. Bei den Untersuchungen mit Uran fällt diese Mobilisierung deutlich geringer aus. Zudem ist der Einfluss der Ionenstärke in Gegenwart von Huminsäure annähernd zu vernachlässigen. Neben den Versuchen bei Raumtemperatur wurden die Versuche ebenfalls bei 60 °C wiederholt. Im binären wie auch im ternären System führt die steigende Temperatur zu einer erhöhten Sorption. Dieser Effekt ist jedoch bei Uran deutlich ausgeprägter als im Fall von Europium.

Dynamische Sorptions-Desorptionsuntersuchungen wurden in Form von miniaturisierten Säulenexperimenten (MSE) mittels LC-ICP-MS-Kopplung als Frontalanalysen mit kontinuierlicher Zufuhr der Probenlösung durchgeführt. Hierzu wurde die HPLC-Anlage zur Erzeugung von schnellen Gradienten umgerüstet (Eliminieren von Totvolumina) und wichtige Parameter optimiert.

Erste via LC-ICP-MS gemessene Durchbruchkurven von Europium in Kaolinit, als Ergebnis der Frontalanalysen, zeigen eine signifikante Retardierung von gelöstem Europium im Vergleich zum Inertmarker 1-Brompropan.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Im nächsten Berichtszeitraum werden Sorptionsisothermen von Europium und Uran bei zwei verschiedenen pH-Werten (pH 5+7) aufgenommen. Neben der Aufnahme von klassischen Sorptionsisothermen wird auch die Desorption noch näher untersucht wobei hier von unterschiedlichen Konzentrationen ausgegangen wird. Dabei soll der Mechanismus hinter der Desorption analysiert werden, welcher vermutlich von der Sorption abweicht. Ähnlich der Sorption sollen Desorptionskurven aufgetragen werden, welche erste Anhaltspunkte über ablaufende Mechanismen liefern sollen.

Die auftretende Europium-Retardierung an Kaolinit soll quantifiziert und hinsichtlich der vorherrschenden Kinetik ausgewertet werden. Zudem sollen erhaltene Säulen-K<sub>d</sub>-Werte mit K<sub>d</sub>-Werten aus Batch-Versuchen verglichen werden. Neben Kaolinit wird in weiteren Experimenten OPA als Säulenmaterial bzw. Uran als Analyt verwendet werden, um so einen Vergleich von Kaolinit- mit OPA-Säulen bzw. Europium mit Uran hinsichtlich der Retentionsparameter durchführen zu können.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Hein, C., Sander, J.M., Kautenburger, R., Beck, H.P. & G. Kickelbick (2013), ICP-MS measurement of samples with high salinity – sample clean up or transient measurement- (Poster), Migration Conference, Brighton, Great Britain.

Kautenburger, R., Hein, C., Sander, J.M., Beck, H.P. & G. Kickelbick (2013), Analysing metal speciation and mobility in clay – from ICP-MS batch experiments to a new approach of miniaturized clay column experiments (MCCE) using LC-ICP-MS (Poster), Migration Conference, Brighton, Great Britain.

Sander, J.M., Hein, C., Kautenburger, R., Beck, H.P. & G. Kickelbick (2013), Batch experiments made easy - automation of ICP-MS batch experiments, (Poster), Migration Conference, Brighton, Great Britain.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Technische Universität München, Arcisstr. 21, 80333 München		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11001</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im natürlichen Tongestein und in salinaren Systemen – Teilprojekt 5: Technische Universität München		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.07.2011 bis 30.06.2014	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2013 bis 31.12.2013	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 566.966,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Krüger	

### 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Vorhabensziele:

- Quantenmechanische Modellierung der Sorption von Actinidenspezies an Tonmineraloberflächen.
- Quantenmechanische Modellierung der Komplexierung von Actiniden mit Tonorganika und in salinaren Lösungen

Bezug zu anderen Vorhaben:

Teilprojekt im Verbund „Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im natürlichen Tongestein und in salinaren Systemen“.

### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Das Untersuchungsprogramm umfasst folgende Arbeitspakete:

- Adsorption von Actiniden an Tonmineralien
- Komplexierung von Actiniden in Lösung.

Arbeitspaket 1 (AP) umfasst quantenmechanische Berechnungen periodischer Modelle von Tonmineralien sowie die Untersuchungen der Adsorption von Actinidenspezies auf Tonmineraloberflächen. In AP2 werden computerchemische Untersuchungen zu Komplexen von Actiniden in wässriger Lösung durchgeführt. Schwerpunkte sind die Modellierung der Komplexierung durch Tonorganika und in salinärer Lösung sowie insbesondere organische und anorganische Americiumkomplexe.

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1.2: Adsorption von U(VI) und Np(V); AP1.4 Hydrolyse an Tonmineraloberflächen; AP2.1 Komplexe in salinärer Lösung; AP2.2: Anorganische Am(III)-Komplexe  
Modellierungen zur Adsorption von Uranyl(VI) auf solvatisierten Kantenflächen schichtgeladener 2:1-Tonmineralen (AP1.2) wurden fortgeführt. Die Adsorption von Uranyl auf der Oberfläche (110) wurde um weitere Komplexe ergänzt. Am Beispiel der Oberfläche (010) wurde für die Plätze AlOH<sub>2</sub><sup>+</sup> und AlO-SiOH Uranyl und Uranylmonohydroxid als Adsorbat verglichen (AP1.4). Diese Beispiele zeigen keine Präferenz für eines der Adsorbate für ver-

schiedene Modellminerale. Für die Adsorptionsplätze AlOH-SiO und AlO-SiOH wurden exemplarisch Komplexe mit 4- und 5-facher Koordination des Uranylions verglichen. Ergänzende dynamische Simulationen von Uranylkomplexen auf den Plätzen AlOHOH und AlOH-SiO von Pyrophyllit und Montmorillonit zeigen im Vergleich zu Optimierungen etwas längere U-O-Bindungen zur Oberfläche und etwas kürzere Kontakte zu Wasserliganden. Für Uranyl auf dem AlOHOH-Platz wurde Hydrolyse beobachtet, in Übereinstimmung mit zuvor berechneten Komplexbildungsenergien. Rechnungen zu Vibrationen adsorbierten Uranyl- und Uranylmonohydroxids auf Kaolinit unterschätzen gemessene Schwingungsfrequenzen, wohl als Folge der DFT-GGA-Methode. Interessanterweise wurde eine Kopplung der Uranylschwingungen mit Biegeschwingungen von Hydroxylgruppen gefunden.

Untersuchungen zur Komplexierung bei endlicher Ionenstärke (AP2.1) hinsichtlich des Effekts der Dielektrizitätskonstanten wurden um Uranyldiacetat ergänzt. Wie bei Monoacetat ergab sich eine leichte Stabilisierung der Komplexe unabhängig vom betrachteten Isomer. Für Uranylformiat ist der Effekt kleiner. In Übereinstimmung mit Experimenten zeigen die Rechnungen, dass Formiat monodentat koordiniert und schwächer komplexiert als Acetat.

Rechnungen zur Komplexierung von Actiniden mit Borsäure und Borat wurden insbesondere für Am(III) fortgeführt (AP2.2). Ein Vergleich des Boratanions mit Perchlorat und Acetat sowie entsprechender Na-Modellkomplexe hinsichtlich der Sauerstoffladungen sowie des Ladungsübertrags von Natrium zeigt, dass Borat ähnlicher zu Acetat als Perchlorat ist. Dies stützt bisherige Hinweise, dass innersphärische Komplexe mit Actiniden möglich sind, auch wenn klare experimentelle Ergebnisse fehlen. Genauere Modellierungen des Am(III)-Aquakomplexes als Referenz zeigen eine bevorzugte Koordination von 8-9 sowie Bindungslängen in Übereinstimmung mit dem Experiment. Wie für U(VI) ist für Am(III)-Borsäurekomplexe eine außersphärische Koordination etwas stabiler als die monodentate, so dass bei niedrigem pH keine innersphärischen Komplexe zu erwarten sind. Mono- und bidentate Am(III)-Monoboratkomplexe zeigten sich als etwas weniger stabil als ein monodentater U(VI)-Komplex. Im Gegensatz zu U(VI) wurden für Am(III) stabile außersphärische Boratkomplexe gefunden. Im Falle von U(VI) nimmt außersphärisches Borat ein Proton des Uranyl-aquakomplexes auf (Hydrolyse) und zerfällt in Borsäure und Wasser. Dies kann eine innersphärische Komplexierung behindern. Die schwächere Hydrolyse von Am(III) erklärt die stabilen außersphärischen Komplexe. Mit der Modellierung von Am(III)-Hydroxiden wurde begonnen, auch um das Gleichgewicht zwischen Borat- und Hydroxidkomplexen für Am(III) zu beleuchten.

#### 4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1.2: Adsorption von U(VI) und Np(V);
- AP1.4: Hydrolyse an Tonmineraloberflächen;
- AP2.1: Komplexe in salinärer Lösung;
- AP2.2: Anorganische Am(III)-Komplexe;
- AP2.3: Wechselwirkung von Am(III) mit Organika.

#### 5. Berichte, Veröffentlichungen

A. Kremleva, S. Krüger, N. Rösch: Density functional modeling of uranyl adsorption on solvated 2:1 clay minerals, Vortrag, 14. International Conference on the Chemistry and Migration Behaviour of Actinides and Fission Products in the Geosphere, Migration 2013.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Universität Potsdam, Am Neuen Palais 10, 14469 Potsdam		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11011</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im natürlichen Tongestein und in salinaren Systemen – Teilprojekt 6: Universität Potsdam		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.07.2011 bis 30.06.2014	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2013 bis 31.12.2013	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 340.296,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Kumke	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Ziel des Forschungsvorhabens ist die weiterführende Charakterisierung der Wechselwirkungen von Lanthanoid-Ionen (als natürliche Analoge der Actinide) mit endlagerrelevanten Systemkomponenten bei hohen Ionenstärken und erhöhten Temperaturen zur Erweiterung des molekularen Prozessverständnisses im natürlichen Tongestein bzw. in salinaren Systemen. Zur Erreichung dieses Ziels werden verschiedene laserbasierte Methoden – zeitaufgelöste und stationäre Lumineszenzspektroskopie sowie Transientenabsorptionsspektroskopie – eingesetzt, die mit weiterführenden Methoden wie der konfokalen Raman-Mikroskopie als bildgebendem Verfahren ergänzt werden.

Das geförderte Projekt 02 E 11011 ist ein Teilvorhaben des Verbundprojektes „Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im natürlichen Tongestein und in salinaren Systemen“, das gemeinsam mit den Universitäten Dresden, Heidelberg, Mainz, München, Saarbrücken sowie des Karlsruher Institutes für Technologie (KIT) und dem Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf (HZDR) durchgeführt wird. Eine thematische Verknüpfung besteht vor allem zu den Projektpartnern an der TU Dresden, der TU München und der Universität Heidelberg sowie dem HZDR und dem Institut für Nukleare Entsorgung (KIT).

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Speziationsuntersuchungen unter besonderer Berücksichtigung von Ion-Ion-Wechselwirkungen bei hohen Ionenstärken
- AP2: Photophysik von Eu(III)-Komplexen mit Modellliganden bei hohen Ionenstärken bzw. erhöhten Temperaturen
- AP3: Komplexierung von Eu(III) durch Polymere und natürliche organische Liganden bei hohen Ionenstärken unter Berücksichtigung der Kationen- bzw. Anioneneigenschaften
- AP4: Photophysik von Eu(III)-Komplexe mit Tonmineralphasen in An- und Abwesenheit von Modellliganden bei hohen Ionenstärken bzw. erhöhten Temperaturen



### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- Vergleichend zu den Messungen in Wasser wurde mit der Präparation und Messung von Proben in deuteriertem Wasser begonnen. Als Startpunkt wurde das System Europium(III)/Natriumglycolat gewählt. Hier wurde die Konzentration des Natriumglycolats bei einer Ionenstärke von  $I = 0.1$  (Natriumchlorid) variiert, höhere Ionenstärken sind derzeit in Arbeit (s. u.).
- Fortsetzung der spektroskopischen Untersuchungen mit dem Modellpolymer. Hierfür wurde eine Verbesserung der Synthese angegangen, um für die geplanten Messungen ausreichend Substanz in einer einheitlichen Charge zur Verfügung zu haben. Dieses Polymer wurde als Komplexbildner für verschiedene Lanthanoid(III)-Ionen (Samarium(III), Dysprosium(III) und Europium(III)) eingesetzt. In den Messungen wurde der Einfluss des pH-Wertes und der Ionenstärke auf die Lumineszenz der Lanthanoide in An- und Abwesenheit eines Energieakzeptors für einen Inter-Lanthanoid-Energietransfer untersucht. Aus der Stärke der Löschung der Donorlumineszenz konnte indirekt auf Konformationsänderungen des Polymers geschlossen werden.
- Fortführung der Arbeiten zur Komplexierung von Eu(III) durch aquatische Huminstoffe (Gorleben Humin- und Fulvinsäure) bei verschiedenen Ionenstärken mit Natriumchlorid bzw. Magnesiumchlorid als Hintergrundelektrolyte. Diese Messungen wurden zudem unter Variation der Temperatur durchgeführt. Als Messgrößen wurden Änderungen der intrinsischen Huminstofffluoreszenz sowie die sensibilisierte Lanthanoidlumineszenz aufgezeichnet und mit Hinblick auf die Bestimmung von konditionellen Komplexbildungskonstanten ausgewertet.
- Weiterführung der Charakterisierung der Temperaturabhängigkeit (Bereich von 5 °C bis 80 °C) der Lumineszenzeigenschaften von Eu(III) in Komplexen mit niedermolekularen Liganden.
- Gemeinsam mit dem HZDR wurden Lumineszenzmessungen von Europium(III)-Borsäure-Feststoffen bei tiefen Temperaturen ( $T = 5$  K) durchgeführt.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Weiterführung der Arbeiten zum Einfluss der Ionenstärke und Temperatur auf die Komplexierung von Eu(III) durch niedermolekulare organische Liganden in  $H_2O$  und  $D_2O$
- Untersuchung des Sorptionsverhaltens der Lanthanoide an Kaolinit aus  $D_2O$ -Lösungen
- Raman-mikroskopische Messungen in Huminstoff-Kaolinit-Systemen
- Weitere Lumineszenz-basierte Experimente zur Sorption von Eu(III) bzw. von niedermolekularen organischen Liganden auf Mineraloberflächen. Mittels Nd(III) wird über die Auswertung der Resonanzenergietransfer-Effizienz der mittlere Abstand zwischen auf der Oberfläche sorbierten Ionen bestimmt werden.
- Fortsetzung der Kooperation im Bereich der hochauflösenden Lumineszenzmikroskopie mit dem KIT-INE.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Madlen Rühlmann: Einfluss der Ionenstärke und des pH-Wertes auf die Konformation von Polymeren, Bachelorarbeit, Universität Potsdam 2013.

Max Schütte. Konkurrenz von Metallionen um Bindungsstellen in natürlicher organischer Materie, Bachelorarbeit, Universität Potsdam, in Vorbereitung

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Technische Universität Dresden, Helmholtzstr. 10, 01069 Dresden		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11021</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im natürlichen Tongestein und in salinaren Systemen – Teilprojekt 7: Technische Universität Dresden		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.07.2011 bis 30.06.2014	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2013 bis 31.12.2013	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 315.249,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Bernhard	

### 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Ziel der Arbeiten ist die Ableitung thermodynamischer Daten zur Wechselwirkung von Am(III) mit endlagerrelevanten Liganden in (hoch)salinaren Medien. Das Hauptaugenmerk liegt auf Untersuchungen zur Komplexbildung von Am(III) mit Borat und kleinen organischen Liganden, die als Modell für natürliche organische Materie (mobile Tonorganika, Huminstoffe) fungieren.

Die ermittelten thermodynamischen Daten (Komplexbildungskonstanten, Enthalpien und Entropien, Wechselwirkungskoeffizienten) sollen zu einer wirklichkeitsgetreuen Modellierung der Wechselwirkung von Am(III) in realen salinaren Medien beitragen und vorhandene Lücken in den thermodynamischen Datenbasen schließen. Erstmals sollen Am(III)-Boratspezies in Lösung direkt spektroskopisch und thermodynamisch charakterisiert werden.

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

### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Einsatz der Mikrotitrationskalorimetrie:

Direkte Bestimmung der thermodynamischen Daten (Enthalpie, Entropie) zur Wechselwirkung von Eu(III)/Am(III) mit Borat und organischen Modellliganden mittels Mikro-Titrationskalorimetrie in Abhängigkeit verschiedener Untersuchungsparameter (pH, I, T und Medium)

AP1: Untersuchung im System Am(III)-Borat-salinare Lösung

Spektroskopische Charakterisierung von Am(III)-Boratspezies in Lösung u. a. mittels TRLFS, UV-Vis, FT-IR und Ramanspektroskopie sowie Bestimmung der thermodynamischen Daten zur Komplexbildung von Am(III) mit Borat unter Standardbedingungen ( $T=25\text{ °C}$ ,  $I<0.1\text{ M NaClO}_4$ ) und in salinaren Medien unter Variation von Ionenstärke (bis 3 M), Salzmedium (NaCl,  $\text{MgCl}_2$ ) und Temperatur (bis  $80\text{ °C}$ ) bei  $\text{pH} > 7$

AP2: Untersuchungen im System Am(III)-NOM-salinare Lösung

Bestimmung der thermodynamischen Daten zur Komplexbildung von Am(III) mit sauerstoffhaltigen Modellliganden (u. a. von Salicyl-, Propion-, Wein-, Pyromellitsäure) unter Variation von pH (2-9), Ionenstärke (bis 3 M), Salzmedium (NaCl,  $\text{MgCl}_2$ ) und Temperatur (bis  $80\text{ °C}$ ).

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1:

- Die Charakterisierung des isolierten Eu(III)-Borat Feststoff wurde weitergeführt. Aus  $^{11}\text{B}$ -NMR Spektren, gemessen mit einem 800 MHz NMR-Spektrometer eine Eu-Pentaborat-Spezies identifiziert werden. Festkörper-TRLFS-Untersuchungen bei Raum- und Tieftemperatur (durchgeführt an der Uni Potsdam, AG Michael Kumke) ergaben die charakteristisch aufgespaltenen Spektren sowie vergleichbare Fluoreszenzlebensdauern (600-800  $\mu\text{s}$ ), wie sie in Eu-Borat-Suspension beobachtet wurden. Die Tieftemperaturmessungen ergaben, dass eine zweite Europium-Feststoffspezies (vermutlich Eu-Carbonat-Spezies) co-präzipitierte.
- Im Komplexierungssystem Eu(III)-(Poly)borate wurde für den Komplex der Struktur  $\text{EuB(OR)}_4^{2+}$  eine Komplexierungskonstante von  $\log \beta = 2,02 \pm 0,16$  ermittelt. Diese Konstante gilt für alle Eu-(Poly)borat Komplexe bei denen (Poly)borate mit einer negativen Ladung (z. B. Monoborat, Triborat, Pentaborat) beteiligt sind.
- Im Komplexierungssystem Eu(III)-Salicylat- bzw. Lactatoborate wurde für den Komplex der Struktur  $\text{EuB(OR)}_4^{2+}$  (R = Salicylat oder Lactat) eine Komplexierungskonstante der Größenordnung  $\log \beta \sim 2$  bestimmt. (für Eu-Salicylatoborat-Komplex:  $\log \beta = 1,77 \pm 0,24$  mittels TRLFS,  $\log \beta = 2,11 \pm 0,07$  mittels  $^{11}\text{B}$ -NMR-Spektroskopie, für den Eu(III)-Lactatoborat Komplex:  $\log \beta = 2,38 \pm 0,21$  mittels TRLFS). Diese Werte sowie erste Ergebnisse von DFT-Berechnungen bestätigen den Ansatz, organische Boratester als analoge Strukturen für anorganische Borate anzunehmen.

AP2:

- Die Komplexierung von  $\text{Nd}^{3+}$  mit Malonsäure und Pyromellitsäure wurde als Funktion der Ionenstärke (bis 3 mol/kg NaCl) mittels ITC untersucht. Für den 1:1  $\text{Nd}^{3+}$ -Malonat-Komplex wurden folgende thermodynamischen Standarddaten ( $I = 0$  mol/kg  $T = 25$  °C) mittels SIT-Anpassung ermittelt:  $\log \beta^0 = 5,29 \pm 0,06$ ,  $dH^0_1 = 14,74 \pm 0,23$  mol·kJ $^{-1}$ ,  $dS^0_1 = 108 \pm 1$  J·mol $^{-1}$ ·K $^{-1}$ . Die Daten für den 1:1  $\text{Nd}^{3+}$ -Pyromellitat-Komplex werden derzeit noch ausgewertet.
- Untersuchungen zur thermodynamischen Charakterisierung der Komplexierung von  $\text{Am}^{3+}$ ,  $\text{Nd}^{3+}$ ,  $\text{Eu}^{3+}$  mit Oxalsäure in Abhängigkeit der Ionenstärke an NaCl wurden begonnen.
- Mittels ITC wurden die thermodynamischen Werte der ersten Protonierungsstufe von Oxalat als Funktion der NaCl-Konzentration bestimmt. Die ermittelten Standardwerte ( $\log K^0_{11}$ ,  $\Delta_R H^0_{11}$ ,  $\Delta \epsilon$ ) stimmen sehr gut mit Literaturwerten überein.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Fortführung der Untersuchungen zur thermodynamischen Charakterisierung der Komplexierung von  $\text{Am}^{3+}$ ,  $\text{Nd}^{3+}$ ,  $\text{Eu}^{3+}$  mit Oxalsäure in Abhängigkeit der Ionenstärke
- Untersuchungen zur thermodynamischen Charakterisierung Komplexierung von  $\text{Am}^{3+}$ ,  $\text{Nd}^{3+}$ ,  $\text{Eu}^{3+}$  mit Malonsäure im  $\text{CaCl}_2$ -Medium
- abschließende Arbeiten zum Eu-(Ligand-)Boratsystem (u. a. DFT-Rechnungen,  $^{11}\text{B}$ -NMR-Spektroskopie) zur Ermittlung der thermodynamischen Standarddaten

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

J. Schott, M. Acker et al.: Investigation of the System Ln(III)/An(III)-B(OH) $_3$ -Organics

Migration Conference, Brighton, GB, September 8.-13., 2013, Vortrag

M. Acker et al.: Thermodynamic studies of complex formation of trivalent Nd, Am by small organic ligands with micro titration calorimetry, Migration Conference, Brighton, GB, September 8.-13., 2013, Posterbeitrag

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg, Seminarstr. 2, 69117 Heidelberg		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11031</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im natürlichen Tongestein und in salinaren Systemen – Teilprojekt 8: Universität Heidelberg		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.07.2011 bis 30.06.2014	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2013 bis 31.12.2013	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 196.296,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Panak	

### 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Ziel dieses Verbundprojektes ist die Aufklärung des geochemischen Verhaltens von Actiniden im natürlichen Tongestein unter dem Einfluss von nieder- und makromolekularer Organik (Huminstoffe, Tonorganika) bei höheren Ionenstärken sowie höheren Temperaturen. Die Arbeiten innerhalb dieses Teilprojektes beschäftigen sich mit dem Komplexierungsverhalten niedermolekularer tonorganischer Substanzen wie Propionat, Laktat etc. sowie makromolekulare Tonorganik und Kerogen mit dreiwertigen Actiniden im Temperaturbereich bis 90 °C. Dadurch sollen wichtige thermodynamische Daten der im geochemischen Milieu im Nah- und Fernbereich eines Endlagers ablaufenden Reaktionen der dreiwertigen Actinidionen erhalten werden. Das Projekt liefert somit einen entscheidenden Beitrag für eine thermodynamisch fundierte Sicherheitsanalyse zur Langzeitsicherheit von nuklearen Endlagern. Des Weiteren werden grundlegende Erkenntnisse bezüglich des Komplexierungsverhaltens der trivalenten Actiniden und Lanthaniden erhalten, die auch in anderen wissenschaftlichen Bereichen von großer Bedeutung sein können.

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

### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Bestimmung der temperaturabhängigen  $pK_s$ -Werte der verwendeten Ligandensysteme und pH-Wert-Messungen bei erhöhten Temperaturen
- AP2: Komplexierung von Cm(III) mit niedermolekularen organischen Substanzen bei höheren Ionenstärken sowie höheren Temperaturen
- AP3: Komplexierung von Cm(III) mit Humin-/Fulvinsäuren/Kerogen bei höheren Ionenstärken sowie höheren Temperaturen
- AP4: Strukturelle Untersuchungen von Ln(III)/Am(III)-Komplexen mit (ton)organischen Liganden mittels Hochtemperatur-EXAFS-Spektroskopie

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Die Untersuchungen zum Cm(III)-Acetat-System in verschiedenen Elektrolytmedien ( $\text{NaClO}_4$ ,  $\text{NaCl}$ ,  $\text{CaCl}_2$ ) und  $T = 25 - 90$  °C wurden abgeschlossen. Die Ergebnisse stehen in guter Übereinstimmung zueinander und zeigen einen Anstieg der Stabilitätskonstanten um bis zu einer Größenordnung im untersuchten Temperaturbereich. Die Komplexierungsreaktionen der verschiedenen

Cm(III)-Acetat Komplexe ( $[\text{CmAc}_n]^{3-n}$ ,  $n = 1-3$ ) weisen alle samt positive  $\Delta_r H_m^0$ - und  $\Delta_r S_m^0$ -Werte auf.

Die Untersuchungen zur Wechselwirkung von Cm(III) mit Oxalat wurden auf Temperaturen bis 90 °C erweitert. Es konnte bestätigt werden, dass im Temperaturbereich von 25 bis 90 °C lediglich  $\text{Ox}^{2-}$  mit Cm(III) Komplexe bildet und  $\text{HOx}^-$ ,  $\text{H}_2\text{Ox}$  und  $\text{NaOx}^-$  als Liganden ausgeschlossen werden können. Des Weiteren wurden für die Komplexe  $\text{Cm}(\text{Ox})_n^{3-2n}$  ( $n = 1-4$ ) die entsprechenden thermodynamischen Daten ( $\log K_n^0(T)$ ,  $\Delta_r H_m^0$ ,  $\Delta_r S_m^0$ ) ermittelt. Die Ergebnisse zeigen, dass die Bildung der 1:1-Komplexes exotherm verläuft, während die nachfolgenden Komplexbildungsschritte positive Enthalpiewerte aufweisen. Dies deutet auf eine chelatisierende Side-On-Koordination des ersten Liganden hin, während die weiteren Liganden offensichtlich End-On koordinieren.

Zudem wurden erste EXAFS-Messungen zur Wechselwirkung von Am(III) mit Oxalat in Abhängigkeit des pH-Wertes bei  $T = 25$  °C durchgeführt. Bei  $\text{pH} = 1$  und  $\text{pH} = 3$  deuten die Ergebnisse klar auf eine Side-On-Koordination des Liganden hin. Bei  $\text{pH} = 5$  tritt jedoch eine signifikante Änderung der Struktur des Komplexes auf. Wie der Ligand unter diesen Bedingungen gebunden ist, bedarf noch weiterer Untersuchung.

#### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Weiterführende EXAFS-Untersuchungen der Komplexbildung von Am(III) mit Oxalat als Funktion der Ligandenkonzentration, des pH-Wertes und der Temperatur.
- Fortführung der TRLFS-Untersuchungen zur Komplexbildung von Cm(III) mit Oxalat in einem 1:2-Elektrolytmedium ( $\text{CaCl}_2$ ) und bei erhöhten Temperaturen.
- NMR-Untersuchungen zur Komplexbildung von Cm(III) mit Oxalat als Funktion der Temperatur, des pH-Wertes und der Ionenstärke.
- EXAFS-Untersuchungen zur Komplexbildung von Am(III) mit Acetat in Abhängigkeit des pH-Wertes.

#### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Fröhlich, D.R., Skerencak, A., Panak, P.J., A spectroscopic study on the formation of Cm(III) acetate complexes at elevated temperatures, Dalton Trans., in press, DOI: 10.1039/c3dt52989d.

Skerencak-Frech, A., Fröhlich, D.R., Rothe, J., Dardenne, K., Panak, P.J., Combined time-resolved laser fluorescence spectroscopy and extended x-ray absorption fine structure spectroscopy study on the complexation of trivalent actinides with chloride at  $T = 25-200$  °C, Inorg. Chem., in press, DOI: 10.1021/ic4025603.

Skerencak-Frech, A., Fröhlich, D.R., Panak, P.J., The thermodynamics of the complexation of Cm(III) with small organic ligands under saline conditions and increased temperatures, 13th International Conference on the Chemistry and Migration Behaviour of Actinides and Fission Products in the Geosphere, Migration '13 (2013).

Fröhlich, D.R., Skerencak-Frech, A., Panak, P.J., A combined EXAFS and TRLFS spectroscopic study to determine the thermodynamic and structural properties of trivalent actinide complexes with organic and inorganic ligands at elevated temperatures, 13th International Conference on the Chemistry and Migration Behaviour of Actinides and Fission Products in the Geosphere, Migration '13 (2013).

Fröhlich, D.R., Skerencak-Frech, A., Panak, P.J., Spektroskopische Untersuchungen zur Komplexbildung von Am(III)/Cm(III) mit einfachen organischen Liganden bei erhöhten Temperaturen, GDCh Wissenschaftsforum (2013).

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Technische Universität Clausthal, Adolph-Römer-Str. 2 a, 38678 Clausthal-Zellerfeld		<b>Förderkennzeichen:</b>  <b>02 E 11041</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Kopplung der Softwarecodes FLAC3D und TOUGH2 in Verbindung mit in situ-, laborativen und numerischen Untersuchungen zum thermisch-hydraulisch-mechanisch gekoppelten Verhalten in Tongestein unter Endlagerbedingungen		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2011 bis 30.09.2014		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2013 bis 31.12.2013
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 707.587,00 EUR		<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Lux

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Im Rahmen der Suche nach einem geeigneten Wirtsgestein für die Endlagerung radioaktiver Abfälle wird in Deutschland seit nunmehr etwa einem Jahrzehnt die Erforschung von Tongestein verstärkt vorangetrieben. Dabei liegt der Fokus auf der wissenschaftlichen Erfassung der Beziehungen zwischen den dort ablaufenden thermischen, hydraulischen und mechanischen (THM) Prozessen. Derartige gleichzeitig auftretende THM-Prozesse im Tongestein können sowohl das mechanische Verhalten wie auch die hydraulischen und die thermischen Eigenschaften sehr stark verändern. Daher muss im Hinblick auf eine das Langzeitverhalten eines Endlagers im Tongestein behandelnde Sicherheitsanalyse das gekoppelte thermisch-hydraulisch-mechanische Verhalten des Tongesteins beobachtet sowie physikalisch modelliert werden.

Die wissenschaftliche Erfassung der THM-Prozesse umfasst neben in situ- und laborativen Analysen auch die Formulierung und rechnerische Implementierung THM-gekoppelter physikalischer Modelle sowie deren Validierung anhand von In-situ-Messdaten. Vor diesem Hintergrund besteht das Hauptziel des Vorhabens darin, die EDV-Programme *FLAC<sup>3D</sup>* und *TOUGH2* im Hinblick auf die Simulation von mechanisch-hydraulisch-thermischen Prozessen im Tonsteingebirge unter Endlagereinwirkungen zu koppeln. Ausgangspunkt ist dabei das EDV-Programm *FLAC<sup>3D</sup>*, da die geomechanische Simulation in ihrer Beeinflussung durch die geohydraulischen Prozesse im Vordergrund stehen soll. Anhand entsprechender experimenteller Untersuchungen sollen noch fehlende physikalische Grundlagendaten ermittelt werden. Darüber hinaus soll mit Blick auf das zeitabhängige Gesteinsverhalten die in den Vorhaben 3607R02596 (BfS) und 02E10427 (BMW) erarbeitete In-situ-Messdatenbank erweitert und als ein Fallbeispiel (von mehreren) zur Validation des neuen Prognoseinstrumentariums herangezogen werden.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Datenaufarbeitung zu *FLAC<sup>3D</sup>* (F) und *TOUGH2* (T),
- AP2: Aufarbeitung laborativer Kenntnisse zu HM-Tongesteinseigenschaften,
- AP3: int. Literaturrecherche zum THM-Materialverhalten von Tongestein / offene Fragen,
- AP4: Erarbeitung einer F-T-Schnittstelle für Modellgitter und Randbedingungen,
- AP5: Erarbeitung von F-T-Kopplungsroutinen zur Übertragung der H $\leftrightarrow$ M-Einflüsse,
- AP6: Erarbeitung von Referenzbeispielen,
- AP7: Durchführung von ersten Testsimulationen,
- AP8: Identifizierung und Charakterisierung implementierter Stoffmodelle,
- AP9: Organisation des In-situ-Untersuchungsprogramms,
- AP10: Ergänzung des In-situ-Equipments,
- AP11: Abstimmung und Durchführung einer Bohrkernbeschaffungskampagne,

- AP12: Durchführung der In-situ-Untersuchungen Mont Terri & Tournemire,
- AP13: Erstellung eines Laborprogramms / Anpassung bestehender laborativer Ausrüstung,
- AP14: Durchführung eigener laborativer Untersuchungen,
- AP15: Ableitung von standortbezogenen repräsentativen Materialdaten,
- AP16: Durchführung von numerischen Simulationen / Qualitäts- und Effizienzüberprüfung,
- AP17: Validierung von physikalischer Modellierung und numerischer Simulation,
- AP18: Vorstellung und Diskussion der Arbeiten,
- AP19: Dokumentation der Arbeiten, Generalisierung der Befunde, Abschlussbericht.

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

- AP3: Begleitende Literaturrecherche und -einarbeitung.
- AP4/5: Ausbau der bestehenden F-T-Schnittstelle und -Kopplungsfunktionen, auch insbesondere hinsichtlich Modelldiskretisierung (→ Erarbeitung von Methoden zur Berücksichtigung bestimmter Diskretisierungsstrukturen) und Postprocessing (→ Schnittstellenmodifikation in F und T zur Übergabe von Zweiphasenfluss-Berechnungsergebnissen aus T); weitere Befassung mit dem Fortran-Quellcode für TOUGH2 (Implementierung von Relativpermeabilitätsfunktionen).
- AP6: Vorbereitung eines komplexeren In-situ-Beispiels in Kooperation mit der GRS Braunschweig.
- AP12: Videoobservation, Kalibermessungen und Luftfeuchtigkeitsmessungen innerhalb der Bohrlöcher an bisher insgesamt zehn/drei Observationsterminen (URL Mont Terri/ Tournemire).
- AP14: Durchführung von zwei weiteren einaxialen Dauerstandversuchen.
- AP17: Abschließende Arbeiten zur Verifikation/Validierung zum Einphasenfluss durch Gegenüberstellung von F- & F-T-Resultaten.
- AP18: Kontaktaufnahme mit der GRS Köln und Fachgespräch: Präsentation und Diskussion der Arbeiten und der bisherigen Ergebnisse zum Ein- und Zweiphasenfluss.
- AP19: Dokumentation/Beginn der Verfassung des Abschlussberichts (In-situ-Arbeiten, Einphasenfluss).

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

- AP2: Aufarbeitung eigener laborativer Befunde sowie Dokumentation.
- AP3: Weitere Befassung mit der vorliegenden Literatur.
- AP4/5: Erweiterung nach Bedarf; Erweiterung der Kopplungsroutinen hinsichtlich mechanisch beeinflusster Porositäten.
- AP7: Durchführung weiterer Testsimulationen an Modellbeispielen aus AP6 zur Behebung von verbliebenen Unstimmigkeiten und Unklarheiten.
- AP12: Durchführung abschließender Bohrlochobservationsarbeiten im URL Tournemire im 2. Quartal 2014.
- AP14: Durchführung weiterer einaxialer Dauerstandversuche und Fortführung des verbleibenden triaxialen Dauerstandversuches.
- AP16/17: Durchführung von F-T-Zweiphasenflussberechnungen zum vorbereiteten In-situ-Beispiel aus AP6 und Verifikation anhand von CODE\_BRIGHT-Vergleichssimulationen der GRS Braunschweig (Mont Terri, BDM-B1).
- AP19: Fortführung der Dokumentationsarbeiten und des Abschlussberichts.

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

Keine.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Technische Universität Clausthal, Adolph-Römer-Str. 2 a, 38678 Clausthal-Zellerfeld		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11051</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Optimierung der numerischen Effizienz von Verfahren zur Sensitivitätsanalyse im Hinblick auf Modelle zur Analyse der Langzeitsicherheit von Endlagern		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2011 bis 30.09.2014	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2013 bis 31.12.2013	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 183.075,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Röhlig	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Ziele des Vorhabens sind die Erfassung und gegebenenfalls Weiterentwicklung numerisch effizienter Methoden der Sensitivitätsanalyse. Die numerische Effizienz soll anhand von Testfällen mit Praxisbezug überprüft und bewertet werden. Weiterhin ist geplant, methodische Grundlagen zur Sensitivitätsanalyse bei zeitabhängigen Simulationsergebnissen zu erarbeiten sowie die Wirkungsweise von Metamodellen und deren Potential hinsichtlich einer Verbesserung der numerischen Effizienz zu untersuchen.

Das Vorhaben wird in Zusammenarbeit mit der GRS Braunschweig in Anlehnung an das Forschungsvorhaben MOSEL durchgeführt.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Identifizierung numerisch effizienter Methoden zur Sensitivitätsanalyse und Herausarbeitung ihres theoretischen Hintergrunds
- AP2: Definition von Testfällen, bei denen die Überprüfung der numerischen Effizienz im Vordergrund steht
- AP3: Testen, Bewerten und Weiterentwickeln der numerisch effizienten Methoden im Rahmen der AP3 und 4 des Forschungsvorhabens MOSEL (02 E 10941)
- AP4: Theoretische und praktische Untersuchungen zum Einfluss von Zeitabhängigkeiten auf die Sensitivitätsanalyse
- AP5: Untersuchung der Wirkungsweise von Parameter-Transformationen auf die Sensitivitätsanalyse
- AP6: Untersuchung der Steigerungsfähigkeit der numerischen Effizienz durch Verwendung von Metamodellen



### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Der Beitrag für das OECD/NEA-Symposium wurde entsprechend der Review-Anmerkungen überarbeitet und eingereicht, der Vortrag erfolgte am 08. Oktober 2013.

Das HLW-Modell wurde weiterentwickelt und aufgetretene Fehler behoben. Die angedachten >80 % Nullläufe konnten für die Summendosis nicht erreicht, jedoch kann dieser Fall über Nuklid-Einzelbetrachtungen abgebildet werden. Die Problematik von Abhängigkeiten wurde anhand der Modelle untersucht, wobei sich herausstellte, dass Abhängigkeiten für eine Sensitivitätsanalyse kontraproduktiv sind, da die abhängigen Parameter nicht mehr getrennt voneinander betrachtet werden können. Zusätzlich kann der Samplingraum nicht mehr vollständig abgedeckt werden, was Ergebnisse verfälschen kann.

Die Untersuchung zeitabhängiger Sensitivitätsmaße muss immer unter Berücksichtigung der Varianz erfolgen, da die Ergebnisse so normiert und verglichen werden können. Ohne Betrachtung der Varianz haben die zeitabhängigen Sensitivitätsmaße nahezu keine Aussagekraft. Die Aussagekraft kann weiter gesteigert werden, indem direkt zeitbeeinflussende Parameter, z. B. Lösungszutrittszeitpunkt, als Konstante Einfluss finden. Die einzelnen Realisationen können nachträglich auf der Zeitachse verschoben werden, so dass ein gewählter Referenzpunkt, z. B. erstes Versagen eines Verschlussbauwerks, maximaler Radionuklid-Flux, zum gleichen Zeitpunkt auftritt. Dies ermöglicht die Bewertung der zeitlichen Entwicklung vor und nach diesem Referenzpunkt.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Im Laufe der folgenden sechs Monate soll die Untersuchung der Methoden zur Sensitivitätsanalyse abgeschlossen und diese final bewertet werden. Die Auswirkungen von Abhängigkeiten auf die Analyse sollen aufgrund der Komplexität der Fragestellung überwiegend theoretisch und unterstützend durch Beispiele betrachtet werden.

Die Untersuchung zeitabhängiger Sensitivitätsanalysen soll gegebenenfalls zusätzlich um eine Analyse über einen Modellzeitrahmen von 100 Millionen Jahren ergänzt werden.

Die Wirkungsweise von Transformationen, insbesondere solche, die nicht rangbasiert sind, soll im Hinblick auf eine Steigerung der Aussagekraft der Analyseergebnisse untersucht werden, ebenso die Aussagekraft und Robustheit von Metamodellen zur Verwendung in der Sensitivitätsanalyse. Weiterhin soll ein vorläufiger Abschlussbericht erstellt werden.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

S. Kuhlmann, K.-J. Röhlig, E. Plischke: First Results from the Project: Numerical Efficiency Optimization of Sensitivity Analysis Methods with Regard to Analysis Models of Long Term Safety for Nuclear Disposal Sites. Proceedings of 3<sup>rd</sup> US/German Workshop on Salt Repository Research, Design and Operation. Oct 8 – 11, 2012, Sandia National Laboratories, Albuquerque, NM, USA.

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11061A</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Methodik und Anwendungsbezug eines Sicherheitsnachweiskonzeptes für ein HAW-Endlager im Tonstein		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.09.2011 bis 30.06.2016	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2013 bis 31.12.2013	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 814.700,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Rübel	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das verfügbare Instrumentarium für eine sicherheitliche Bewertung von Endlagern für hochaktive Abfälle im Tonstein in Deutschland wird überprüft und bewertet. Die Anforderungen an die einzusetzenden Instrumentarien und benötigten Daten werden katalogisiert. Der Katalog behandelt konzeptuelle Modelle, Szenarienanalyse, Bewertung der Wirksamkeit geologischer und technischer Barrieren (Integrität) sowie Bewertung möglicher Freisetzungen. Es wird geprüft, inwieweit adäquate Instrumentarien und Daten vorliegen und wie deren Anwendbarkeit auf der Grundlage vorliegender FuE-Ergebnisse zu bewerten ist. Schwerpunkte und Zielstellungen für ergänzende FuE-Arbeiten werden in Form einer Defizitanalyse formuliert.

Die gemeinsame Bearbeitung durch BGR, GRS und DBE TECHNOLOGY soll eine ausgewogene und vollständige Betrachtung aller Instrumentarien gewährleisten.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Geologie der relevanten Tonsteininformationen und zugehöriges Endlagerkonzept
- AP2: Methodik des Sicherheitsnachweises für ein HAW-Endlager im Tonstein in Deutschland
- AP3: FEP-Selektion und Szenarientwicklung
- AP4: Möglichkeit des Nachweises der Sicherheit in der Betriebs- und kontrollierten Nachbetriebsphase
- AP5: Nachweiskonzept und Konsequenzenanalyse für die Langzeitsicherheit von Standorten im Tonstein
- AP6: Berichtswesen

GRS ist federführend für das Arbeitspaket 5. Dieses gliedert sich in die Unteraufgaben:

- AP5.1: Erstellung des Nachweiskonzeptes
- AP5.2: Bewertung der Datenlage
- AP5.3: Bewertung des Instrumentariums

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Es wurden im Berichtszeitraum 10 Arbeitsgespräche mit den drei am Projekt beteiligten Organisationen durchgeführt. Die diskutierten Inhalte betrafen vor allem die Inhalte des FEP-Katalogs für das Endlagerstandortmodell Nord, die Ausprägungen der Initial-FEP und Integritätskriterien für das Wirtsgestein. Die Arbeiten in den Arbeitspaketen waren:

- AP1: Diskussion und Kommentierung der von der BGR verfassten Berichte zum geologischen Endlagerstandortmodell Süd.
- AP2: Erstellung und Diskussion eines Berichts zu den Integritätskriterien des Wirtsgesteins. Der inhaltliche Beitrag der GRS in der Erstellung des Berichts betraf dabei vor allem die Zusammenstellung der Auswirkungen erhöhter Temperaturen auf das Wirtsgestein.  
Überarbeitung des Entwurfs zum Sicherheitskonzept und dessen Diskussion, insbesondere im Hinblick auf die Anforderungen an die Verschlüsse und den Versatz.
- AP3: Überarbeitung und Diskussion der Inhalte des FEP-Katalogs. Identifikation und Korrektur von Inkonsistenzen in der Argumentation. Es wurde eine konsistente Version des FEP-Katalogs erstellt, die als Grundlage für die weitere Szenarienanalyse dient.  
Diskussion der Methodik der Szenarienanalyse und Beginn der Szenarienanalyse mit der Erarbeitung der Ausprägung der im FEP-Katalog betrachteten Initial-FEP.
- AP5: Erarbeitung eines ersten Entwurfs des Berichts zum Nachweiskonzept für das Endlagerstandortmodell Nord einschließlich der Bewertung des Instrumentariums zur Sicherheitsanalyse, sowie der Datenlage für den Langzeitsicherheitsnachweis im Hinblick auf erste orientierende Analysen. Beurteilung der Relevanz der bestehenden Ungewissheit der Daten im Hinblick auf die Berechnung der Radionuklidenausbreitung aus dem ewG.  
Durchführung von Überschlagsrechnungen zum Zutritt von Lösungen in das Grubengebäude und der Dauer der Wiederaufsättigung des Nahfelds.  
Durchführung von ersten orientierenden Rechnungen zur Radionuklidenausbreitung für das Endlagerstandortmodell Nord.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1: Diskussion des Endlagerstandortmodells Süd und des dazugehörigen Endlagerkonzepts.
- AP2: Anpassung des Sicherheitskonzepts an den Stand der Diskussion.
- AP3: Fortführung der Szenarientwicklung für das Endlagerstandortmodell Nord und Beginn der Bearbeitung des FEP-Katalogs für das Endlagerstandortmodell Süd.
- AP5: Diskussion des Berichtsentwurfs zum Nachweiskonzept.  
Weiterführung der Rechnungen zur Radionuklidenausbreitung als Grundlage der Diskussion des Endlager- und Nachweiskonzepts.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<b>Auftragnehmer:</b> DBE Technology GmbH, Eschenstr. 55, 31224 Peine		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11061B</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Methodik und Anwendungsbezug eines Sicherheitsnachweiskonzeptes für ein HAW-Endlager im Tonstein		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.09.2011 bis 30.06.2016	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2013 bis 31.12.2013	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 711.665,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Jobmann	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Gesamtziel dieses Vorhabens ist es, zu prüfen, ob und wie ein Sicherheitsnachweis für ein HAW-Endlager in Tonstein in Deutschland geführt werden kann. Dabei wird zunächst der konzeptionelle Ansatz für einen Sicherheitsnachweis in prinzipieller Anlehnung an das Sicherheits- und Nachweiskonzept für einen Standort im Salz entwickelt, wobei die Methodik zum Nachweis der Integrität der geotechnischen und geologischen Barrieren im Vordergrund steht. Voraussetzung für einen Sicherheitsnachweis ist ein umfassender FEP-Katalog, der auf der Beschreibung der geologischen Gesamtsituation, der geowissenschaftlichen Langzeitprognose, dem Abfallmengengerüst und dem Endlagerkonzept sowie einer Abschätzung aller zukünftig im Endlagersystem zu erwartenden Prozesse basiert, und in dem alle zukünftig relevanten Eigenschaften, Ereignisse und Prozesse beschrieben sind. Es ist daher ein Teilziel, aufbauend auf dem VSG-FEP-Katalog, die FEP zu selektieren bzw. zu ergänzen, die für eine Endlagerung in deutschen Tonsteinformationen relevant sind. Diese sollen für die zwei Referenzregionen in einem FEP-Katalog Nord und einem FEP-Katalog Süd dokumentiert werden, die dann die Grundlage für die Szenarienentwicklung bilden.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Geologie der relevanten Tonsteinformationen und zugehöriges Endlagerkonzept
- AP2: Methodik des Sicherheitsnachweises für ein HAW-Endlager im Tonstein in Deutschland
- AP3: FEP-Selektion und Szenarienentwicklung
- AP4: Möglichkeit des Nachweises der Sicherheit in der Betriebs- und kontrollierten Nachbetriebsphase
- AP5: Nachweiskonzept und Konsequenzenanalyse für die Langzeitsicherheit von Standorten im Tonstein
- AP6: Berichtswesen

Die DBE TECHNOLOGY GmbH ist federführend für AP2, AP4 und AP6 und bearbeitet im AP1 den Unterpunkt 1.2.

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im Berichtszeitraum wurde ein erster Entwurf für ein Einlagerungs- und Verschlusskonzept für das Endlagerstandortmodell SÜD erstellt. Diese Konzeptionen dienen als Grundlage für den für die Region SÜD zu entwickelnden FEP-Katalog und die anschließende Szenarienanalyse sowie für die Integritätsnachweise der geologischen und geotechnischen Barrieren.

Um den Integritätsnachweis der geologischen Barriere quantitativ führen zu können, ist es notwendig, die in den Sicherheitsanforderungen beschriebenen Kriterien soweit zu quantifizieren, dass sie im Rahmen von rechnerisch zu führenden Nachweisen abgehandelt werden können. Aus diesem Grund wurden verfügbare Informationen aus Versuchen in Untertagelaboratorien und aus der einschlägigen Fachliteratur über Prozesse, die, bedingt durch ein Endlager, zu einer Veränderung des Wirtsgesteins führen können, ausgewertet. Quantitativ formuliert wurden das Dilatanz-Kriterium, das Fluidruck-Kriterium, das Advektions-Kriterium und das Temperatur-Kriterium. Die Ergebnisse wurden in einem Technischen Bericht abschließend dokumentiert.

Die Integritätsnachweise werden rechnerisch geführt. Es kommen dabei zwei numerische Codes, OpenGeoSys (BGR) und FLAC3D (DBETEC), zum Einsatz. Bevor Modellberechnungen an den generischen Standorten durchgeführt werden, wurde anhand eines Benchmarks die grundsätzliche Vergleichbarkeit der verwendeten Programme untersucht, um die Verlässlichkeit der Aussagen unabhängig vom eingesetzten Computer Code sicher zu stellen. Ein Schwerpunkt lag dabei auf der Simulation von gekoppelten Prozessen, wie sie in einem HAW-Endlager zu erwarten sind. Mit den Ergebnissen des Benchmark konnte gezeigt werden, dass geeignete Werkzeug zur Führung von Integritätsnachweisen zur Verfügung stehen. Die Ergebnisse wurden in einem Technischen Bericht abschließend dokumentiert.

Basierend auf dem ersten FEP-Katalog für die Referenzregion Nord wurde damit begonnen, in Vorbereitung auf die Szenarienanalyse, die Ausprägungen der sogenannten Initial-FEP abzuleiten. Initial-FEP sind wahrscheinliche FEP mit direkter Einwirkung auf die Barrieren.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Abschluss der Arbeiten zur Ableitung der Ausprägungen für die Initial-FEP für die Referenzregion Nord zur Vorbereitung der Szenarienanalyse.

Abschließende Diskussion und Fertigstellung des Einlagerungs- und Verschlusskonzeptes für die Referenzregion SÜD.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Jobmann, M., Meleshyn, A., Maßmann, J., Polster, M. (2013): Ableitung und quantitative Formulierung der Integritätskriterien für die geologische Barriere zur Verwendung im Rahmen der Nachweismethodik, Technischer Bericht, DBE TECHNOLOGY GmbH, BGR, GRS.  
 Maßmann, J., Jobmann, M., Li, S., Nowak, T., Polster, M. (2013): Code-Benchmark zur Vorbereitung numerischer Berechnungen zum Nachweis der Integrität der geologischen Barriere, Technischer Bericht, DBE TECHNOLOGY GmbH, BGR

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR), Stilleweg 2, 30655 Hannover		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11061C</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Methodenentwicklung und Anwendung eines Sicherheitsnachweiskonzeptes für einen generischen HAW-Endlagerstandort im Tonstein (AnSichT)		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Endlagersystem		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.03.2012 bis 30.06.2016	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2013 bis 31.12.2013	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 568.514,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Keller	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Auf Grundlage des derzeitigen Standes von Wissenschaft und Technik zur HAW-Endlagerung sowie unter Berücksichtigung international bewährter Konzepte für Sicherheitsnachweise in verschiedenen geologischen Formationen wird eine Methodik des Sicherheitsnachweises für ein HAW-Endlager im Tongestein erarbeitet und dessen Anwendbarkeit an jeweils einem generischen Modellstandort für Nord- und Süddeutschland getestet. Eine Differenzen-Betrachtung der beiden Modelle zueinander und zu einem Standort im Wirtsgestein Salz (VSG) wird vorgenommen.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Geologie der relevanten Tongesteinsformationen und zugehöriges Endlagerkonzept
  - AP2: Methodik des Sicherheitsnachweises für ein HAW-Endlager im Tongestein (Deutschland)
  - AP3: FEP-Selektion und Szenarienentwicklung
  - AP4: Möglichkeit des Nachweises der Sicherheit in der Betriebs- und kontrollierten Nachbetriebsphase
  - AP5: Nachweiskonzept und Konsequenzenanalyse für die Langzeitsicherheit von Standorten im Tongestein
  - AP6: Berichtswesen
- Die BGR ist federführend für die Arbeitspakete 1 und 3.

Zu bearbeitende Unteraufgaben:

- AP1.1: Kriterien zur Auswahl von Referenzregionen und generischer Endlagerstandorte
- AP1.2: Zusammenstellung der Gesteinseigenschaften; Integritätsuntersuchungen „NORD“ und „SÜD“
- AP1.3: Beschreibung der geologischen Endlagerstandortmodelle „NORD“ und „SÜD“
- AP3.1: Prognose der weiteren geologischen Entwicklung für die Endlagerstandortmodelle „NORD“ und „SÜD“.
- AP3.2: Beschreibung der geologischen FEPs „NORD“ und „SÜD“
- AP3.3: Erarbeitung und Beschreibung der Szenarien „NORD“ und „SÜD“

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

Im Berichtszeitraum wurden die Arbeiten zu 1.2. und 1.3 für das Modell SÜD fortgesetzt, Berichtsentwürfe liegen vor.

Die Berichte zur geologischen Langzeitprognose (3.1) für die Modelle NORD und SÜD liegen als Entwurf vor und befinden sich in der BGR-internen Qualitätskontrolle.

Die Zusammenstellung der Inhalte der geologischen FEP für das Modell NORD (3.2) und die Ausweisung der Abhängigkeiten zu anderen FEP wurden fertiggestellt, mit der Erarbeitung des FEP-Katalog Berichts (NORD) wurde begonnen.

Für das Modell NORD wurde mit der Ableitung der geologischen Inhalte aus den FEP für die Szenarientwicklung begonnen (3.3).

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Fertigstellung der Berichte zur Unteraufgabe 1.2. und 1.3 (SÜD) sowie den Berichten zu 3.1 (Langzeitprognosen).

Fertigstellung des Berichts zum FEP-Katalog (NORD) im kommenden Halbjahr (3.2).

Beginn der Bearbeitung geologischer FEP für das Modell SÜD (3.2).

Fertigstellung der Szenarientwicklung und Bearbeitung des Szenarienberichts (3.3).

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

Keine.

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11062A</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Modellierung von Datenungewissheiten auf hybriden Rechnern mit d <sup>3</sup> f und r <sup>3</sup> t (H-DUR)		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.03.2012 bis 31.08.2015	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2013 bis 31.12.2013	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 1.179.070,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Schneider	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Mit den Programmpaketen d<sup>3</sup>f und r<sup>3</sup>t stehen Werkzeuge zur Modellierung der Grundwasserströmung und des Radionuklidtransportes durch poröse Medien (Projekte GRUPRO bzw. TRAPRO) mit expliziter Berücksichtigung von Klüften und Kluftsystemen zur Verfügung (E-DuR). Mehrskalensätze ermöglichen ihre Anwendung auf dichte geklüftet-poröse Gesteine großer geologischer Formationen (A-DuR).

Ziele dieses Projektes sind eine deutliche Beschleunigung und eine wesentlich verbesserte Handhabung der Rechenprogramme d<sup>3</sup>f und r<sup>3</sup>t, ein verbesserter Umgang mit Modell- und Parameterungewissheiten sowie die Integration der Codes zu einem einheitlichen Werkzeug. Die Prä- und Postprozessoren werden den erweiterten Anforderungen angepasst. Damit wird die Einsetzbarkeit von d<sup>3</sup>f und r<sup>3</sup>t für Langzeitsicherheitsanalysen erheblich verbessert.

Die Untersuchungen werden in Zusammenarbeit mit der Universität Jena (Prof. Attinger) und der Universität Frankfurt (Prof. Wittum) durchgeführt. Das Steinbeis-Forschungszentrum „Technische Simulation“ (Dr. Heisig) ist über einen Unterauftrag eingebunden.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

- AP1: Leitung des Vorhabens
- AP7: Entwicklung eines umfassenden graphischen Benutzerinterfaces
- AP8: Simulation ausgewählter Systeme
- AP9: Testrechnungen zur Verifizierung der Neuentwicklungen
- AP10: Erstellung des gemeinsamen Abschlussberichtes und Erweiterung der Anwenderhandbücher



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

Am 7. November fand das dritte Projekt-Statusgespräch beim G—CSC in Frankfurt statt. Die Arbeitsgruppen stellten ihre Arbeiten zum Projekt vor und verständigten sich über das weitere Vorgehen.

Auf der Basis einer bei der GRS installierten Testversion wurden die Anforderungen an das graphische Benutzerinterface spezifiziert.

Ein Konzept für die Implementierung der Cauchy-Randbedingungen für den Salztransport wurde erarbeitet und auf dem Statusgespräch vorgestellt. Eine Cauchy-Randbedingung für den Wärmetransport wurde implementiert.

Die Implementierung zusätzlich benötigter Arten und Kombinationen von Quellen wurde fortgesetzt. Weitere Anforderungen an die Bilanzierungsmethoden wurden spezifiziert.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Die Arbeiten werden entsprechend der im Antrag angegebenen Vorgehensweise fortgesetzt.

- Die Arbeit an den Randbedingungen und Bilanzierungsmethoden wird fortgesetzt.
- Die Arbeiten am Benutzerinterface werden weitergeführt.
- Testfälle zur Verifizierung der Neuentwicklungen werden ausgewählt.
- Die Struktur des Abschlussberichtes wird mit den Projektpartnern abgestimmt.

Das zweite Statusgespräch wird voraussichtlich im Mai 2014 stattfinden.

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

Keine.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Friedrich-Schiller-Universität Jena, Fürstengraben 1, 07743 Jena		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11062B</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Modellierung von Datenungleichheiten auf hybriden Rechnern mit $d^3f$ und $r^3t$ (H-DUR)		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.06.2012 bis 28.02.2015	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2013 bis 31.12.2013	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 185.266,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Attinger	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Ziel des Verbundvorhabens ist die grundlegende Erweiterung der numerischen Modelle  $d^3f$  und  $r^3t$  zur Einsetzbarkeit in Langzeitsicherheitsanalysen. Bisher simulierten  $d^3f$  und  $r^3t$  die Strömungs- und Transportmodellierung von Sedimentgesteinen in heterogenen porösen und geklüftet-porösen Medien.

Strömungs- und Transportmodelle im geologischen Untergrund und deren Vorhersagezuverlässigkeit sind mit Parameterungewissheiten behaftet, da meist zu wenig Informationen oder Messdaten, insbesondere der räumlichen Verteilung von hydraulischen Leitfähigkeiten oder der Porositäten, vorliegen. Vorhersagen sollten daher den Einfluss dieser Ungewissheiten berücksichtigen und die zu entwickelnden Modelle sollten Wahrscheinlichkeitsverteilungen für die Schadstoffkonzentrationen im Untergrund liefern.

Die Untersuchungen werden in Zusammenarbeit mit der Universität Frankfurt (Prof. Wittum), dem Steinbeis-Forschungszentrum „Technische Simulation“ (Dr. Heisig) und der Gesellschaft für Reaktorsicherheit in Braunschweig (GRS, Frau Schneider) durchgeführt.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Bei der Durchführung des Verbundvorhabens wird folgendes Arbeitspaket von der Arbeitsgruppe Attinger (Universität Jena) bearbeitet:

AP4: Berücksichtigung von Ungewissheiten:

- Generierung räumlich verteilter Zufallsfelder mit bestimmten geologischen Eigenschaften (hydraulische Leitfähigkeiten, Porositäten)
- Simulation von Strömungs- und Schadstofftransportsituationen mittels Monte-Carlo-Simulationen
- Berechnung von Wahrscheinlichkeitsverteilungen von Schadstoffverteilungen mittels der Methode der „filtered probability density functions“
- Lösung der hochdimensionalen Transportgleichung & Vergleich mit Monte-Carlo-Simulationsergebnissen

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

- Das Ziel dieses Arbeitspaketes ist die Herleitung einer Gleichung für die Wahrscheinlichkeitsverteilung von gelösten Konzentrationen, um die Unsicherheiten quantifizieren zu können. In früheren Projekten wurde die heterogene Konzentration durch einen geeignet gewählten Mittelwert ersetzt. Innerhalb dieses Projekts soll die gesamte Wahrscheinlichkeitsverteilung der Konzentration berechnet werden.
- Ausgehend von Ansätzen der filtered probability density functions“ wurde die Gleichung der PDF-K für Stoff-Transport durch poröse Systeme umformuliert. Effektive Parameter der Gleichung konnten hergeleitet bzw. durch Approximationen explizit genannt werden. Diese Approximationen werden als Schließung bezeichnet. Es gibt in der Literatur verschiedene Schließungsansätze. Aufbauend auf den vorherigen Projekten konnten wir einen eigenen Schließungsansatz für Stofftransport durch poröse Medien vorschlagen, der in der weiteren Arbeit überprüft werden soll. Dabei wird die PDF-K wird zur Anfangszeit vorgegeben werden- etwa als Delta-Distribution – und entwickelt sich dann entsprechend dieser Bewegungsgleichung. Damit kann die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion der Konzentration bestimmt werden.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

- Lösung der Wahrscheinlichkeitsverteilung der Konzentration in 2D oder 3D.
- Vergleich der Ergebnisse mit anderen Simulationsergebnissen, z. B. Monte-Carlo-Simulationen.

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

Keine.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Johann Wolfgang Goethe-Universität Frankfurt am Main, Senckenberganlage 31, 60325 Frankfurt		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11062C</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Modellierung von Datenungewissheiten auf hybriden Rechnern mit $d^3f$ und $r^3t$ (H-DUR)		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.03.2012 bis 31.05.2015	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2013 bis 31.12.2013	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 653.031,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Wittum	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Ziele des Projekts sind eine deutliche Beschleunigung und eine wesentlich verbesserte Handhabung der Rechenprogramme  $d^3f$  und  $r^3t$ , ein verbesserter Umgang mit Modell- und Parameterungewissheiten sowie die Integration der Codes zu einem einheitlichen Werkzeug. Damit soll die Einsetzbarkeit von  $d^3f$  und  $r^3t$  für Langzeitsicherheitsanalysen erheblich verbessert werden. Hierzu soll im Projekt die Portierung auf Mehrkern- und Graphikprozessoren (AP2), die Umsetzung eines hochskalierbaren gekoppelten DD-Mehrgitterlösers (AP3), die Kopplung von  $d^3f$  und  $r^3t$  (AP5) sowie Löser für hochdimensionale Probleme (AP6) eingebracht werden.

Im Rahmen des Projekts sollen Datenstrukturen und Methoden für strukturierte Gitter in einem eigenen Modul implementiert werden. Ferner soll die Speicherverwaltung neu organisiert werden, so dass Speicherzugriffe auf den Zielsystemen GPUs- und Multicore-Systeme optimal effizient sind. Außerdem soll das erstellte Modul auf Mehrkern- und Graphikprozessoren (OpenCL) und auf Multicore-Systeme (OpenMP) portiert werden. Diese Techniken sollen dann auf unstrukturierte Gitter übertragen werden. In einem weiteren Arbeitsschritt soll die grundlegende Gebietszerlegungsstruktur in einem eigenen Modul in UG 4 implementiert werden. Sodann soll in diesem Modul ein FETI-DP-Löser mit innerem parallelen Mehrgitterlöser implementiert werden. Anschließend sollen Löser für die Kopplungsoperatoren entwickelt und umgesetzt werden. Aufbauend auf diesen Arbeiten soll eine softwaretechnische Kopplung von  $d^3f$  und  $r^3t$  auf der Basis von UG 4 erfolgen. Ferner soll ausgehend von dem implementierten Modul für strukturierte Gitter die Kombinationstechnik für dünne Gitter aus SG2 in UG 4 umgesetzt werden. Dieses Dünngittermodul soll parallelisiert werden. Die Dimensionsreduktion soll mit Hilfe der Taylor-ANOVA-Entwicklung erfolgen.

Die Ergebnisse werden zusammen mit den Projektpartnern verwertet. Das Simulationssystem UG ist weltweit über 380-mal lizenziert. Diese Nutzergemeinde ist eine ausgezeichnete Plattform zur Verbreitung und Verwertung der Projektergebnisse.

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

Das Verbundprojekt ist ein Folgevorhaben der beiden BMBF-Projekte vom 01.10.2006 – 31.03.2011 (FKZ 02 E 10326) und vom 01.10.2008 – 30.09.2012 (FKZ 02 E 10568).

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

AP2: Portierung auf Mehrkern- und Graphikprozessoren

AP3: Umsetzung eines hochskalierbaren gekoppelten DD-Mehrgitterlösers

AP5: Kopplung von  $d^3f$  und  $r^3t$

AP6: Löser für hochdimensionale Probleme

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP2: Portierung auf Mehrkern- und Graphikprozessoren

Um eine größtmögliche Flexibilität bei der Diskretisierung zu erlauben, haben wir daran gearbeitet, dünnbesetzte Matrizen flexibel auf Mehrkern- und Graphikprozessoren zu erzeugen. Insbesondere die GPGPUs sind hierbei speziell zu betrachten, da sie kein dynamisches Speichermanagement ermöglichen, was die dynamische Erzeugung von Matrizen schwierig macht. Sämtliche Speichergrößen müssen daher schon vorab bzw. iterativ bestimmt werden. Hierbei gilt es auch zu vermeiden, zu viel Speicher für die Matrix vor zu reservieren, da die GPGPU-Arbeitsspeicher nicht sehr groß sind.

AP3: Umsetzung eines hochskalierbaren gekoppelten DD-Mehrgitterlösers

Es wurde ein weiterer Gebietszerlegungsalgorithmus implementiert: Der Schurkomplement Vorkonditionierer. Bei entsprechender Konfiguration ist er ein Verfahren, das in einem Schritt exakt löst. Der Schurkomplement Vorkonditionierer erwartet als Option einen Löser für den Inneren Löser und einen Löser für das Schurkomplement. Wie beim FETI-Verfahren kann der innere Löser jeder Löser, der bisher in UG4 integriert ist, sein, bis auf den geometrischen Mehrgitterlöser (dieser muss speziell angepasst werden). D. h. lineare Löser/CG mit Mehrgitterlöser, Jacobi, ILU als Vorkonditionierer oder ein direkter Löser. Im Berichtszeitraum haben wir den direkten LU-Löser um einen dünnbesetzten LU erweitert (SparseLU). Zusammen mit einem Minimum Degree Ordering kann dieser SparseLU jetzt auch größere lineare Gleichungssysteme exakt lösen: z. B. bei einem Gorleben-Benchmark ( $d^3f$ ) 500.000 Unbekannte innerhalb einer Minute. Beim klassischen Schurkomplementlöser wird die Schurkomplementmatrix explizit ausgerechnet. Diese kann dann wieder durch einen direkten Löser wie SparseLU (zusammengeführt auf einen Prozessor) oder aber auch durch BiCGStab+ILU gelöst werden. Dabei ist der ILU durch die höhere Parallelität deutlich schneller und in den meisten Fällen eine bessere Wahl. Mit dieser Konfiguration und SparseLU als inneren Löser konnten wir das Gorleben-Problem mit 2.000.000 Unbekannten auf 64 Prozessoren lösen. Wenn die Zeitschrittweite klein ist oder die Änderungen innerhalb des Gebiets nicht sehr groß sind, ist die Diskretisierungsmatrix aus dem vorherigen Zeitschritt eine gute Approximation für die Diskretisierungsmatrix aus dem nächsten Zeitschritt. Daher wurde ein Verfahren implementiert, das den Vorkonditionierer aus dem vorherigen Iterationsschritt als Vorkonditionierer für den nächsten Schritt benutzt. Dadurch wird viel Zeit beim Lösen von Gleichungssystemen innerhalb von nichtlinearen Verfahren eingespart. Für das FAMG-Verfahren wurde eine neue Methode zur Berechnung der Interpolation implementiert.

AP5: Kopplung von  $d^3f$  und  $r^3t$

AP6: Löser für hochdimensionale Probleme

Die Arbeiten in AP5 und AP6 wurden entsprechend dem im Antrag angegebenen Zeitplan fortgesetzt.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Die Arbeiten werden entsprechend der im Antrag angegebenen Vorgehensweise fortgesetzt.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11072A</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt WEIMAR: Weiterentwicklung des Smart-K <sub>d</sub> -Konzepts für Langzeitsicherheitsanalysen – Teilprojekt GRS		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.06.2012 bis 30.11.2016	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2013 bis 31.12.2013	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 1.189.335,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Noseck	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP1: Erstellung der Modelle und Beginn von Modellrechnungen zu den in AP1 ausgewählten Testfällen.
- AP2: Erweiterung des konzeptuellen Modells zur expliziten Berücksichtigung von Al. Ableitung der Gleichungen für K-Feldspat als löslichkeitsbestimmendes Mineral.
- AP3: Durchführung und Auswertung von Säulenexperimenten mit Quarz, Orthoklas und Muskovit inklusive erster Modellrechnungen mit PhreeqC und STANMOD.  
Methodenentwicklung zur Identifizierung von U(VI) Oberflächenkomplexen mittels TRLFS und CSLM sowie Auswertung ersten erfolgreicher Testversuche.  
Durchführung von umfangreichen Batch-Experimenten mit natürlichem Uhry Quarz und eingehende Charakterisierung der intrinsischen und extrinsischen Eigenschaften der Mineralphase.  
Untersuchung des Memory-Effekts bei der Bestimmung von Aluminium-Konzentrationen mittels ICP-MS, Batch-Vorversuche mit Nickel zur Ermittlung der Werte verschiedener Parameter (z. B. Fest/Flüssig-Verhältnis, pH-Wert) für die Hauptversuche.
- AP7: Durchführung von zwei Projekttreffen mit dem Verbundpartner HZDR in Braunschweig und Dresden. Vorstellung von Ergebnissen auf der Goldschmidt-Konferenz.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1: Weiterführung von Modellrechnungen zu den in AP1 ausgewählten Testfällen.
- AP2: Weiterführung der Erweiterung des konzeptionelles Modells: Überführung des Konzeptes in konkrete Algorithmen.
- AP3: Weitere Durchführung von Säulenexperimente mit den Reinmineralphasen Quarz und Orthoklas.  
Auswertung von Säulenversuchen mittels PhreeqC, STANMOD und Vergleich mit bereits ermittelten  $K_d$ -Werten aus Batch-Experimenten.  
Betreuung von zwei Masterarbeiten.  
Speziationsrechnungen mit PhreeqC für Ni und Al, weitere Untersuchung des Memory-Effekts bei Aluminium, Batch-Vorversuch mit Al analog zum Ni-Vorversuch, Batch-Hauptversuche mit Ni beginnen.
- AP7: Durchführung weiterer Projekttreffen mit dem Verbundpartner HZDR.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Flügge, J., Noseck., U., Schneider, A., Stockmann, M. (2013): The Impact of Climate Transitions on the Radionuclide Transport through a Sedimentary Aquifer. In: Cobbing, J; Adams, S; Dennis, I.; Riemann, K [eds]: Assessing and Managing Groundwater in Different Environments, CRC Press, London, 2013. p. 147 – 163.

S. Britz, U. Noseck, V. Brendler, M. Stockmann: Titration curves, column experiments, and reactive transport models, Goldschmidt 2013 Conference Abstracts, p 775.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e.V., Bautzner Landstr. 400, 01328 Dresden		<b>Förderkennzeichen:</b>  <b>02 E 11072B</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt WEIMAR: Weiterentwicklung des Smart-K <sub>d</sub> -Konzepts für Langzeitsicherheitsanalysen – Teilprojekt HZDR		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.06.2012 bis 30.11.2015	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2013 bis 31.12.2013	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 598.956,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Brendler	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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



### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1:

- Festlegung auf reaktiven Transportcode PHAST gekoppelt mit PHREEQC für Vergleichsrechnungen zu r<sup>3t</sup>, dazu Teilnahme an eintägigem Workshop zu PHAST (Prof. Merkel, TU BA Freiberg, 13.06.13), erste Testrechnungen sind erfolgt

AP2:

- Konzept-Erweiterung um zusätzliche Konkurrenzen/Komplexbildner wichtiger Minerale mit Relevanz für Gorleben Sedimenten (Auswahl anhand GRIMM-Berichte)

AP3:

- Experimente zur U(VI)-Sorption an Muskovit (in Abhängigkeit von pH, fest-flüssig-Verhältnis und Urankonzentration)
- Experimente zur U(VI)-Sorption an Orthoklas (Ionenstärkeabhängigkeit)
- Spektroskopische Identifizierung der Uranspezies an Orthoklas und Muskovit
- Erfassung und Charakterisierung des Einflusses von Mikroben auf die Uransorption

AP4:

- Ausreißertest mit den Daten der Redoxpotentiale zur Festlegung der Parametergrenzen für die E<sub>H</sub>-Werte (Mean, Minimum, Maximum)
- Kopplung PHREEQC/UCODE mit Parametervariation E<sub>H</sub>-Werte zur K<sub>d</sub>-Berechnung

### 4. Geplante Weiterarbeiten

AP1:

- Vergleichsrechnungen für komplexere Systeme

AP2:

- Einbeziehung von Redoxprozessen

AP3:

- Experimente zur Sorption von U(VI) an Muskovit (Ionenstärkeabhängigkeit)
- Experimente zur Sorption von U(VI) an Orthoklas (Ca<sup>2+</sup> als Konkurrenzion)
- TRLFS & IR zu Oberflächenkomplexen des U(VI) an Orthoklas und Muskovit
- Planung der Experimente mit Np(V) und Einarbeitung im Umgang mit Np

AP4:

- Verbesserung der Konvergenz bei K<sub>d</sub>-Berechnung mit Variation des Redoxpotentials
- Erweiterung der Datenbasis bezüglich Fe sowie SIT-Koeffizienten

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Britz, S. M., Noseck, U., Brendler, V. Stockmann, M.: Titration curves, column experiments, and reactive transport models, Goldschmidt 2013 Conference, Florence, Italy, 2013.

Flügge, J., Noseck, U., Schneider, A., Stockmann, M.: The Impact of Climate transitions on the Radionuclide Transport through a Sedimentary Aquifer. In: Cobbing, J., Adams, S., Dennis I., Riemann, K. [eds]: Assessing and Managing Groundwater in Different Environments, CRC Press, London, 2013, p. 147-163.

Stockmann, M., Brendler, V., Flügge, J., Britz, S., Noseck, U.: Environmental parameters that determine distribution coefficients of radionuclides for repositories Goldschmidt 2013 Conference, Florence, Italy, 2013.

<b>Auftragnehmer:</b> DBE Technology GmbH, Eschenstr. 55, 31224 Peine		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11082</b>	
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Vergütung der Auflockerungszone im Salinar (VerA) Phase II – Generierung von Rissystemen einer Auflockerungszone im Korngrößenmaßstab und Überführung der Ergebnisse auf die Makroebene zur Simulation eines Injektionsvorganges			
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung			
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.08.2012 bis 31.01.2015		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2013 bis 31.12.2013	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 713.390,00 EUR		<b>Projektleiter:</b> Dr. Müller	

### 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Der Schwerpunkt in dem Vorhaben VerA Phase II liegt in der Entwicklung einer Modellierungsstrategie, mit dem Ziel, den Injektionsprozess zur Abdichtung der Auflockerungszone rechentechnisch abbilden zu können. Auf dieser Grundlage soll der Nachweis für eine qualitätsgesicherte und dauerhafte Abdichtung der an ein Verschlussbauwerk anliegenden Auflockerungszone erbracht werden.

Üblicherweise werden kontinuumsmechanische Modelle zur Modellierung der Auflockerungszone verwendet. Eine kontinuumsmechanische Beschreibung lässt jedoch eine explizite Darstellung der in der Auflockerungszone vorkommenden Rissysteme nicht zu, da die relevanten Verformungen über ein Mittlungsvolumen homogenisiert werden. Aus diesem Grund wurden in der ersten Phase von VerA Strukturmodelle verwendet, die sich an der Kornstruktur von Steinsalz orientieren, um die auf der Kornebene stattfindenden hydraulischen und mechanischen Prozesse einer Auflockerungszone modellhaft abbilden zu können. In der aktuellen Phase soll dieses Strukturmodell hinsichtlich der Leistungsfähigkeit optimiert werden. Die numerischen Entwicklungsarbeiten sollen durch ein umfassendes Laborprogramm ergänzt werden, um die Modelle zu verifizieren. Anschließend soll ein Transfer der aus den kleinräumigen Modellen abgeleiteten Informationen auf eine größere Ebene erfolgen, mit dem Ziel, die Modellierungen mit der Simulation eines Injektionsprozesses abzuschließen.

### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Weiterentwicklung der Polyederstrukturen
- AP2: Validierung des generellen Verformungsverhaltens von Steinsalz und damit verbundener Bruchprozesse
- AP3: Transfer der kleinräumigen Informationen auf großräumige Modelle
- AP4: Mikrostrukturelle Untersuchungen zum Rissystem einer vergüteten Auflockerungszone
- AP5: Abschließende Untersuchungen zur Langzeitstabilität
- AP6: Abschlussbericht

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP1.1: Ziel ist eine geometrische Optimierung der Polyeder, um die Rechenzeiten zu verringern. Zum einen wurde überprüft, ob kleinste Kanten, die bei der Generierung entstehen, durch die Nutzung alternativer Generierungstools vermieden werden können. Die zu diesem Zweck eingesetzte Software Voro++ liefert praktisch identische Voronoinetze. Umfangreichere Untersuchungen stehen aus. Weiter wurde überprüft, ob eine nachträgliche Bereinigung mit der FuE-Software VIRTUS

realisiert werden kann. Die Modelle können grundsätzlich in VIRTUS eingesehen werden, jedoch gibt es noch Probleme durch doppelte Polygonflächen.

- AP1.2: Ziel ist die Implementierung eines Stoffmodells, mit denen Kriechprozesse realitätsnah abgebildet werden können. Es wurde überprüft, ob das in VerAI genutzte Stoffmodell durch eine weiterführende Parameteranpassung ausreichend genaue Ergebnisse liefern kann. Zu diesem Zweck wurde eine Sensitivitätsanalyse durchgeführt. Erste Ergebnisse zeigen eine gute Anpassung mit den Messkurven der Spannungs-Dehnungs-Linien für die Längsdehnung.
- AP1.3: Ziel ist die Anpassung der Polyederstruktur an natürliche Steinsalzgefüge. Es wurden Analysen an Dünnschliffpräparaten durchgeführt, um relevante Gefügeparameter zu bestimmen. Die Untersuchungen wurden im Q4/2013 abgeschlossen und befinden sich in der Auswertung. Ein Vergleich zwischen natürlichen und generierten Mikrogefügen zeigt einen Unterschied bei den Korngrenzen, die in den natürlichen Gefügen naturgemäß wesentlich komplexer strukturiert sind.
- AP2: Ziel ist die Durchführung von akustischen Emissionsmessungen um zu überprüfen, inwieweit das numerisch simulierte Bruchbild mit realen Bruchbildern übereinstimmt. Die Untersuchungen wurden im Q4/2013 abgeschlossen. Erste Ergebnisse belegen, dass sich die Bruchprozesse homogen über die Probe verteilen und zu etwa 90 % auf Zugrissen beruhen. Das Verhalten deckt sich weitestgehend mit den simulierten Bruchbildern. Allerdings gibt es noch Unterschiede bei der Bruchbildungsrate, die in den simulierten Modellen bei stetiger Belastung vermeintlich abnimmt.
- AP4: Ziel ist es, die aus VerAI injizierten Bohrkerne aus einer Streckenkontur hinsichtlich des Rissystems und der Wasserglasinjektion zu untersuchen. Die Untersuchungen wurden im Q4/2013 abgeschlossen und eine Auswertung steht aus.
- AP5: Ziel sind Erkenntnisse zur Abhängigkeit der Si-Löslichkeit von der  $MgCl_2$ -Konzentration. Die Untersuchungen wurden abgeschlossen und eine erste Auswertung belegt, dass die Löslichkeit des Silikatgels sinkt, sobald  $Mg^{2+}$  Ionen in den gesättigten NaCl-Lösungen vorhanden sind. Des Weiteren wurde die Reaktion verschiedener endlagerrelevanter Elemente an Silikatgel in reiner gesättigter NaCl-Lösung bzw. 20 %- $MgCl_2$ -haltigen gesättigten NaCl-Lösung untersucht und entsprechend ausgewertet.

#### 4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1.1: Optimierung der Schnittstellen, um den einwandfreien Import der 3DEC Modelle nach VIRTUS sicherzustellen. Detailliertere Untersuchungen zur Nutzung von Voro++ für eine Voronoi-Generierung.
- AP1.2: Durchführung von weiteren Messreihen für die Sensitivitätsanalyse.
- AP1.3: Vergleich und Anpassung der Polyederstrukturen mit Hilfe der Ergebnisse aus den Dünnschliffuntersuchungen.
- AP2: Auswertung der Ergebnisse und Anpassung der Modelle an die Ergebnisse der akustischen Emissionsmessungen.
- AP3: Die Simulation eines Injektionsvorganges erfordert die Nutzung kontinuumsmechanischer Modelle. Ein entsprechender Workflow bzw. Modelle sollen dazu generiert werden.
- AP4: Abschließende Auswertung der Dünnschliffanalysen zur Bewertung des Rissystems.
- AP5: Auswertung der Untersuchungen zur Langzeitstabilität und Sorption endlagerrelevanter Elemente.

#### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Technische Universität Bergakademie Freiberg, Akademiestr. 6, 09599 Freiberg		<b>Förderkennzeichen:</b>  <b>02 E 11092</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Gefügestabilisierter Salzgrusversatz (GESAV) – Phase 1		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Endlagersystem		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.11.2012 bis 30.04.2015	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2013 bis 31.12.2013	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 307.098,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr.-Ing. Mischo	

### 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Es soll eine Grundrezeptur für einen verbesserten Steinsalzversatz vorgeschlagen werden, dessen Gefüge so stabilisiert ist, dass nach dem Einbau ein praktisch 100 %-iger Befüllungsgrad erreicht wird und die Stützwirkung des Versatzes so hoch ist, dass Auflockerungen (Rissbildungen) im umliegenden Gebirge ausgeschlossen werden können. Gleichzeitig soll eine Anfangspermeabilität des Versatzes von  $< 10^{-14}$  m<sup>2</sup> erreicht werden. Die Parameter Verformungswiderstand und Permeabilität sollen sich mit zunehmender Einwirkungszeit der Gebirgskonvergenz verbessern.

### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Anpassung möglicher Bindemittelsysteme hinsichtlich Mischbarkeit und Benetzung mit Salzgrus
- AP2: Möglichkeiten der Polyhalitbildung durch Anpassung der in AP1 untersuchten Rezepturansätze (Institut für Anorganische Chemie)
- AP3: Laborversuche zur Bestimmung von Festigkeit, Kriech- und Relaxationsverhalten, Permeabilität und Quellverhalten
- AP4: Abschluss Etappe I

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1: Weitere Entwicklung einer Salzgruskörnung, die über eine maximierte Einbaudichte sowie Raumausfüllung verfügt. Versuche an den favorisierten  $\text{CaSO}_4$ -Halbhydratbindemitteln mit den Salzgrusgemischen hinsichtlich Mischbarkeits- und Erstarrungsverhalten.

Am Institut für Anorganische Chemie der TU Bergakademie Freiberg wurden geeignete Ausgangsstoffe für die Bildung von Polyhalit getestet. Es wurden speziell Arkanit ( $\text{K}_2\text{SO}_4$ ) als Kalium-Komponente, Kieserit ( $\text{MgSO}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$ ) sowie entwässerter Epsomit ( $\text{MgSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$  zu  $\text{MgSO}_4 \cdot 1,25\text{H}_2\text{O}$  dehydratisiert) als Magnesium-Komponente und Halbhydrat ( $\text{CaSO}_4 \cdot 0,5\text{H}_2\text{O}$ ) als Calcium-Komponente nach entsprechenden Voruntersuchungen ausgewählt.

AP2: Unter Verwendung der in AP1 ausgewählten Halbhydrate sowie Kaliumsulfat und Kieserit (alternativ entwässerter Epsomit) als Trockenmischung wurde die Polyhalitbildung unter verschiedenen Bedingungen, wie der Zusammensetzung der Anmischlösung, -lösungsmenge und Temperatur (25 °C, 40 °C) untersucht und auch prinzipiell nachgewiesen.

Das Ergebnis ist, dass die Kinetik der Polyhalitbildung gehemmt ist. Die Bildung von Polyhalit wurde bei 25 °C nach ca. 4 Wochen der Probenherstellung nachgewiesen. Bei erhöhter Lagerungstemperatur der Probenkörper (40 °C) konnte die Polyhalitbildung bereits innerhalb einer Woche nachgewiesen werden.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

AP1: Weitere Untersuchungen der festgestellten Bindemittelrezeptur hinsichtlich der Polyhalitbildung sowie des Erstarrungsverhaltens. Versuche der Reaktions- und Lösungsbeschleunigung des Bindemittel-Salzgrusgemisches.

AP2: Untersuchungen zur Kinetik der Phasenbildung (Polyhalitbildung über eventuelle Zwischenphasen) in Abhängigkeit von der Reaktivität der Ausgangskomponenten der „Polyhalit-Trockenmischung“ im Zusammenhang mit der zeitabhängigen mechanischen Stabilisierung von Salzgrus. Analyse der Einflüsse auf die Reaktionskinetik durch die Ausgangsstoffe.

AP3: Herstellen von Probenkörpern und Durchführung von Voruntersuchungen für einen Variantenvergleich.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11102</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Wissenschaftliche Grundlagen zum Nachweis der Langzeitsicherheit von Endlagern		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.08.2012 bis 31.12.2015	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2013 bis 31.12.2013	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 1.447.329,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Noseck	

### 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

TA1: Bearbeitung grundlegender Aspekte

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

TA2: Bearbeitung von Schwerpunktthemen

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

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

TA1:

- Teilnahme an der jährlichen Sitzung der IGSC der IGSC und Teilnahme am Safety Case Symposium mit einem Beitrag über Indikatoren.
- Fertigstellung des Proceedings-Bands zum Workshop "Natural analogues for Safety Cases of repositories in rock salt".
- Weiterführung der Arbeiten zu einem gemeinsamen FEP-Katalog und zum Salt Archive mit SANDIA. Teilnahme mit zahlreichen Beiträgen am Treffen zum Salt Club und zur Deutsch-Amerikanischen Zusammenarbeit in Berlin.
- Anfertigung von zwei Veröffentlichungen zum 13. NAWG Workshop in Nagoya.

- Beginn der Arbeiten zur Bildung und Ausbreitung von C-14 in einem Endlager im Salz in Kooperation mit dem CAST Projekt der EU.
- Teilnahme an der 77. Sitzung des Arbeitskreises HAW-Produkte.
- Erstellung eines Papers für den IAEA/ICTP Workshop in Triest.
- Teilnahme am Jahrestreffen zum EU-Vorhaben „First Nuclides“ in Antwerpen.
- Planung und Koordination der inhaltlichen Arbeiten innerhalb der TSWG zum Thema „Uncertainties“ im Rahmen der IGD-TP auf einem Arbeitstreffen in Berlin.
- Quantifizierung der Inventare von Energie- und Nährstoffquellen für mikrobielle Aktivität in einem Endlager im Ton. Bewertung des Einflusses physikalischer Bedingungen im Buffer auf mikrobielle Aktivität und Empfehlungen zur Minimierung der mikrobiellen Aktivität.

## TA2:

- Teilnahme am Meeting der EBS Task Force in Rånäs, Schweden.
- Entwicklung und Implementierung einer erweiterten Randbedingung für das Aufsättigungsmodell für den Fall der begrenzten Wasserzufuhr.
- Weiterführung des nicht-isothermen Aufsättigungsversuchs. Ein langlaufender Test wurde abgebrochen, weil die gemessene Wasseraufnahme die theoretisch mögliche Obergrenze weit überschritten hatte. Die Ursache ist noch nicht geklärt.
- Weiterführung des isothermen Aufsättigungsversuchs mit eingeschränkter Wasserzufuhr. Hier kam es auch zu erheblichen Diskrepanzen bei den Messungen der Wasseraufnahme. Die Begleitumstände lassen andere Ursachen als bei den nicht-isothermen Tests vermuten.
- Weiterführung der Arbeiten zum Erfahrungsbericht über die Arbeiten am Standort Ruprechtov. Durchführung von zwei Arbeitstreffen in Berlin und Prag.

#### 4. Geplante Weiterarbeiten

## TA1:

- Teilnahme an der jährlichen Sitzung des RWMC.
- Teilnahme an den Aktivitäten der IGSC zum NEA-FEP-Katalog und zum Thema Szenarienentwicklung sowie Aktualisierung des IGSC-Positionspapiers zum Thema Gase.
- Weiterführung der Arbeiten zu einem gemeinsamen FEP-Katalog und zum Salt Archive mit SANDIA. Teilnahme am nächsten Treffen zum Salt Club und zur Deutsch-Amerikanischen Zusammenarbeit in Berlin.
- Arbeitstreffen mit NAGRA zur Diskussion der Radionuklidinventare in CSD-V Abfällen.
- Weiterführung der Arbeiten zur Bildung und Ausbreitung von C-14 in einem Endlager im Salz in Kooperation mit dem CAST Projekt der EU.
- Mitarbeit in und Koordinierung der TSWG zum Thema „Uncertainties“.

## TA2:

- Teilnahme am nächsten Treffen der EBS Task Force in Tokio.
- Weiterführung der laufenden Aufsättigungsversuche; Beseitigung der Fehlerquellen.
- Es wird ein Bericht erstellt, der alle bisherigen Arbeiten zu Task 8 zusammenfasst.
- Weiterbearbeitung und Fertigstellung des Erfahrungsberichts über die Arbeiten am Standort Ruprechtov und Durchführung weiterer Arbeitstreffen.

#### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Wolf, J.; Noseck, U.; Applicability of Indicators in Clay and Salt Representing the Safety Function Containment. Proceedings of the Symposium The Safety Case for Deep Geological Disposal of Radioactive Waste, Paris, 7.-9. October 2013.

<b>Auftragnehmer:</b> DBE Technology GmbH, Eschenstr. 55, 31224 Peine		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11112</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Auswirkungen der Sicherheitsanforderungen Rückholbarkeit auf existierende Einlagerungskonzepte und Anforderungen an neue Konzepte (ASTERIX)		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Endlagersystem		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.09.2012 bis 31.08.2013	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2013 bis 31.08.2013	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 201.913,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Bollingerfehr	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Zielsetzung des Vorhabens ist es, systematisch und wissenschaftlich fundiert die Umsetzung der Sicherheitsanforderung „Rückholbarkeit“ auf die Endlagerkonzeption zu untersuchen und die sicherheitstechnischen Konsequenzen herzuleiten und zu charakterisieren. Die Folgen für die Endlagerkonzeption und -auslegung sowie mögliches Konfliktpotenzial mit anderen Sicherheitsanforderungen soll identifiziert, explizit beschrieben und mögliche Widersprüche aufgezeigt werden. Zum anderen soll die Übertragung der Anforderungen der Rückholbarkeit auf die bereits existierende Einlagerungskonzepte für verschiedene Wirtsgesteine unter Berücksichtigung aktueller Forschungsergebnisse und Veröffentlichungen untersucht werden. Dabei kann auf erste Ergebnisse der Vorläufigen Sicherheitsanalyse für den Standort Gorleben (VSG) für das Wirtsgestein Salz zurückgegriffen werden. Es sollen konzeptionelle Vorschläge für die Berücksichtigung der Rückholungsanforderung bei neuen Endlagerkonzepten erarbeitet sowie Anforderungen an Planung und Durchführung von entsprechenden Demonstrationsversuchen für Einlagerungstechniken hergeleitet werden. Die Möglichkeiten und technischen Grenzen der Rückholungsoption und der notwendige Entwicklungsaufwand sollen beschrieben werden.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Konkretisierung der Sicherheitsanforderung „Rückholung“ und „Bergung“
- AP2: Wirtsgesteinsspezifische Umsetzung der Sicherheitsanforderung „Rückholung“
- AP3: Endlagerkonzeptspezifische Umsetzung:
  - 3.1 horizontale Streckenlagerung von POLLUX-Behältern
  - 3.2 vertikale Bohrlochlagerung von Kokillen
  - 3.3 horizontale Bohrlochlagerung von Transport- und Lagerbehältern
- AP4: Zusammenstellung weiterführender Planungs-, Entwicklungs- und Demonstrationsarbeiten
- AP5: Berichtswesen



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

Das Vorhaben wurde abgeschlossen und ein Abschlussbericht erstellt. Die wesentlichen Ergebnisse dieses Berichtes sind in der Zusammenfassung dokumentiert, die nachfolgend auszugsweise wiedergegeben wird.

Die rechtliche Bewertung der „Sicherheitsanforderungen zur Endlagerung Wärme entwickelnder radioaktiver Abfälle“ führte im Vorhaben zu der Schlussfolgerung, dass durch den bindenden Charakter der Sicherheitsanforderungen für den Antragsteller (BfS) diese auch eine Genehmigungsvoraussetzung darstellen. Als eine Art konkretisierende Verwaltungsvorschrift geben die Sicherheitsanforderungen somit detailliertere Anforderungen zur Erteilung einer Planfeststellung gemäß AtG. Dementsprechend müssen die zur Rückholung geplanten technischen Maßnahmen auch dem Stand von Wissenschaft und Technik entsprechen. Die getroffene rechtliche Einordnung der Rückholung als Genehmigungsvoraussetzung würde nach gegenwärtigem Stand auch unter Berücksichtigung der Regelungen des Standortauswahlgesetzes (StandAG) vom Juli 2013 bestehen bleiben.

Für die drei in Deutschland in Betracht kommenden Wirtsgesteine - Salzgestein, Tongestein und Kristallingestein - wurden Anforderungen zur Gewährleistung der Rückholbarkeit hergeleitet. Wirtsgesteinsspezifische Anforderungen ergeben sich besonders für die bergbaulichen Maßnahmen zur Durchführung der Rückholung. Die Rückholung wurde anhand bekannter Endlagerkonzepte überprüft und es wurde grundsätzlich festgestellt, dass das Einlagerungskonzept der Streckenlagerung in Salz ohne wesentliche Veränderungen beibehalten werden kann (Ansatz: Reminingkonzept); eine ähnliche Einschätzung wurde für das Konzept der Einlagerung von TLB erarbeitet. Bei der Bohrlochlagerung kann eine Rückholbarkeit durch eine Reihe von Anpassungen im Einlagerungskonzept (Verrohrung, angepasste Kokille) erreicht werden. Der Einbau eines Ausbaus ist für ein Endlager im Tongestein zur Gewährleistung einer Rückholbarkeit unvermeidlich. Für eine Umsetzung der Rückholungsanforderung im Tongestein ist deshalb zukünftig das Zusammenspiel von Ausbau und Wiederaufwältigung der Strecken näher zu untersuchen. Eine Rückholung aus einem Endlager im Granitgestein ist auf Grund der günstigen gebirgsmechanischen Eigenschaften grundsätzlich möglich; nach dem heutigen Wissensstand sind in Betracht kommende Standortregionen in Deutschland nur schwer ausweisbar.

Zusammenfassend wird festgestellt, dass eine Rückholung gemäß „Sicherheitsanforderungen für die Endlagerung Wärme entwickelnder radioaktiver Abfälle“ nach dem heutigen Kenntnisstand technisch möglich erscheint; jedoch sind vertiefende Planungen, Nachweise und Demonstrationsversuche notwendig, um für die entsprechenden Maßnahmen und technischen Komponenten den für ein Endlager erforderlichen Stand der Technik zu erreichen.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Keine.

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

Keine.

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln	<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11122</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Entwicklung chemisch-hydraulischer Modelle für die Prognose des Langzeitverhaltens von Sorelbeton in Salzformationen – Kurztitel: LAVA	
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung	
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.09.2012 bis 31.08.2016	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2013 bis 31.12.2013
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 443.525,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Herbert

### 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Es soll ein Modell entwickelt und experimentell abgesichert werden, mit dem die veränderliche Permeabilität eines Dichtbauwerks aus Sorelbeton in Schacht- und Streckenverschlüssen in Salzformationen infolge der Korrosion durch Salzlösungen zeit- und ortsabhängig beschrieben werden kann. Das Modell soll die diffusionsbestimmte, als auch und advektionsbestimmten Korrosion durch die geringpermeable störungsfreie Sorelbeton-Matrix ebenso beschreiben, wie die Korrosion auf Rissen und entlang der Kontaktflächen Dichtbauwerk-Salzgebirge. Das Vorhaben wird in Kooperation mit dem Vorhaben LASA (Langzeitsicherer Schachtverschluss im Salinar) der GRS durchgeführt. Dadurch soll am Ende der beiden Vorhaben ein konsistenter Datensatz für THMC-Modellierungen zum Langzeitverhalten von Dichtbauwerken aus Sorelbeton in Schacht- und Streckenverschlüssen vorliegen.

### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Laborversuche
- AP1.1: Herstellung von Sorelbetonproben und von Korrosionslösungen,
- AP1.2: Ermittlung von Materialkenngrößen des Sorelbetons mit ungestörter Matrix sowie von gestörten Proben
- AP1.3: Kaskadenversuche, Versuche zur Ermittlung des Reaktionspfades der Korrosion mit NaCl- und IP21-Lösung
- AP1.4: Vorbereitung der Versuchsreihen
- AP1.5: Durchführung der Versuchsreihen
- AP1.6: Probenahme und Messungen
- AP1.6.1: Matrixproben
- AP1.6.2: Schnittflächenproben
- AP1.6.3: Proben mit realen Kontaktflächen
- AP1.7: Auswertung der Messdaten
- AP2: Modelltheoretische Arbeiten
- AP2.1: Bereitstellung der thermodynamischen Daten
- AP2.2: Aufstellung, Test und Anpassung eines reaktiven Stofftransportmodells zur Beschreibung des diffusions- und advektiv bestimmten Lösungsangriffs auf die poröse Matrix von Sorelbeton
- AP2.3: Aufstellung, Test und Anpassung eines reaktiven Stofftransportmodells zur Beschreibung des Lösungsangriffs auf Rissen und auf der Kontaktfläche zum Salz
- AP2.4: Programmierarbeiten zur Aufrüstung des Programmpakets OpenGeoSy-Rockflow/ChemApp für die Berechnung der Modelle
- AP3: Simulationsrechnungen
- AP3.1: Geochemische Gleichgewichtsmodellierung der Ergebnisse aus den Kaskadenversuchen
- AP3.2: Nachmodellierung der Versuchsergebnisse aus den Versuchsreihen
- AP4: Dokumentation der Ergebnisse und Abschlussbericht

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1.1: Die Arbeiten zur Herstellung von Proben mit Schnittflächen sowie von Proben mit künstlich provozierten Längsrissen unterschiedlicher Permeabilität wurden weitergeführt. Die Versuche zur Herstellung von Längsrissen wurden abgebrochen, da sich herausstellte, dass das Material dafür zu spröde ist. Mit den Schnittflächenproben wurde fortgefahren. Zylindrische Sorelbetonproben wurden der Länge nach durchgesägt und die Schnittflächen poliert. Für die lose zusammengelegten Hälften wurde eine Gaspermeabilität von  $1,26E-11$  ermittelt. Dieser Wert war höher als erwartet und musste reduziert werden. Dafür wurde die Proben befeuchtet und in Hasslerzellen eingebaut und mit einem Manteldruck beaufschlagt. Auch diese zeitaufwendigen Versuche brachten nicht den erhofften Erfolg. Eine schnelle effektive Verheilung der Schnittfläche und eine Reduzierung der Permeabilität allein über den Manteldruck konnten nicht erreicht werden. Eine weitere Maßnahme wurde ergriffen. Die Schnittflächen wurden mit einer Paste aus puderförmigem Steinsalz in NaCl-Lösung bestrichen und wieder in die Hasslerzelle eingebaut. Mit einem Manteldruck von 100 bar wurde über mehrere Tage die Entwicklung der Gaspermeabilität gemessen. Bereits die Anfangspermeabilität lag nach dieser Maßnahme schon bei  $8,03E-13$ . Nach einer Woche unter 100 bar Manteldruck wurde ein Wert von  $1,52E-14$  ermittelt. Eine weitere Schnittflächenprobe mit Sorel-Paste wurde eingebaut. Ergebnisse hierzu liegen noch nicht vor.

AP1.2: Die Lösungspereabilitäten wurden an weiteren Ausgangsproben mit ungestörter Matrix mit NaCl- und IP21-Lösung bestimmt. Einheitliche Werte um  $5 \cdot 10^{-19} \text{ m}^2$  wurden, unabhängig von der Lösungszusammensetzung, ermittelt.

Die Messungen zur Bestimmung des Lösungsvolumens im Porenraum wurden weitergeführt. Die gemessenen Werte liegen eng zusammen und sind somit reproduzierbar. Sie werden als das zugängliche Porenvolumen der Matrix des Ausgangsmaterials interpretiert. Um diese Ergebnisse abzusichern, soll eine dieser Proben zunächst an das Helmholtzzentrum Dresden-Rossendorf (HZDR, Dr. Lippmann-Piepeke), Forschungsstelle Leipzig, Interdisziplinäre Isotopenforschung geschickt werden. Dort wird das Porenvolumen mittels der PET-Methode bestimmt. Die PET-Messung soll in einem speziell entwickelten und angefertigten Probenbehälter erfolgen. Anschließend wird diese Proben an die Technische Universität Hamburg Harburg (TH HH, Prof. Schmidt-Döhl) geschickt, der die Matrixporosität mittels Hg-Pososimetrie bestimmen soll.

AP1.3: Ein Kaskadenversuch mit NaCl-Lösung wurde abgeschlossen. Die chemischen Analysen wurden durchgeführt. Zurzeit werden die Ergebnisse ausgewertet und mit Modellrechnungen verglichen.

AP1.4: In diesem AP wurden vorbereitende Arbeiten durchgeführt, die dazu dienen, das Fortschreiten der Korrosionsfront beim Eindringen von Lösung zu erfassen. Dafür werden in den Korrosionsversuchen die Korrosionslösungen mit Tracern versehen.

Die Arbeiten zur Ermittlung geeigneter Tracer wurden durchgeführt und sind erfolgreich abgeschlossen. Als geeignete Tracer, die den Lösungen zugesetzt werden, wurden Iod, Cäsium und Strontium ermittelt.

Durch Messungen der Tracerkonzentration an mehreren Teilproben der korrodierten Probe werden Eindringprofile erstellt. Die Technik zur Gewinnung der Teilproben wurde entwickelt. Es wurden Teilproben mit Schleifpapier unterschiedlicher Körnung in Schritten von  $20 \mu\text{m}$  abgetragen. Der Abrieb wurde ausgewogen um so die beste Ausbeute zu ermitteln. Die Tracerverteilung kann dann ermittelt werden, in dem der Abrieb gelöst und chemisch analysiert wird.

AP1.5: Die Versuche zur Matrixkorrosion wurden begonnen. Die weiteren Versuchsreihen mit Schnittflächenproben werden in Kürze aufgenommen. Für die nächsten Versuchsreihen werden zurzeit die letzten noch erforderlichen Probekörper hergestellt und deren Ausgangspermeabilitäten ermittelt.

AP2: Die Arbeiten in AP2.1 wurden abgeschlossen. Mit den Arbeiten in AP2.2 und AP2.3 wurde begonnen und erste Testrechnungen wurden durchgeführt und zufriedenstellende Ergebnisse erzielt.

AP3: Geochemische Modellrechnungen wurden mit der neuen thermodynamischen Datenbasis aus THEREDA durchgeführt und mit früheren Ergebnissen verglichen. Die Ergebnisse waren erwartungsgemäß sehr ähnlich.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Fortführung der Arbeiten zur Herstellung von Probekörpern mit Schnittflächen mit definierter Ausgangspermeabilität und Beginn der Korrosionsversuche mit diesen Proben. Durchführung von Modellierungen des Korrosionsfortschritts und der Permeabilitätsänderungen in der Matrix und Vergleich mit Ergebnissen früherer Experimente der GRS mit Salzbeton. Vergleich der geochemischen Modellrechnungen mit Ergebnissen der abgeschlossenen Kaskadenversuche. Aufnahme der Arbeiten in AP2.4.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Mauke, R., Herbert, H.-J. (2013): Large scale in-situ experiments on sealing constructions in underground disposal facilities for radioactive wastes – examples of recent BfS- and GRS-activities - EUROSAFE-Forum, 4.-5. November 2013, Köln.

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln	<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11132</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Langzeitsicherer Schachtverschluss im Salinar – Kurztitel: LASA	
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Endlagersystem	
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.09.2012 bis 31.08.2016	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2013 bis 31.12.2013
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 491.350,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Czaikowski

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das von der EU im Rahmen des DOPAS-Projektes zu 50 % co-finanzierte Vorhaben hat die Bereitstellung von Labordaten für die modelltheoretische Analyse des Langzeitdichtvermögens von Verschlussmaterialien im Zusammenwirken mit der Auflockerungszone zum Ziel. Hierzu sind die notwendigen Kenntnisse und Daten zum geomechanischen und geohydraulischen Materialverhalten auf der Grundlage von laborativen Untersuchungen zu ermitteln und im Hinblick auf einen fundierten Nachweis der Langzeitdichtfunktion eines Schachtverschlusskonzeptes für ein Endlager in Salzformationen zur Verfügung zu stellen.

Das Gesamtziel des Vorhabens wird durch unterschiedliche Projektbeiträge erreicht:

- Laboruntersuchungen am Salz-/Sorelbeton und am System Beton / Gebirge,
- Prozessanalytische Modellrechnungen zur Validierung der THM gekoppelten Stoffmodelle und zur Verbesserung des Verständnisses der gekoppelten hydraulisch-mechanischen Prozesse im Schachtverschlussystem.

Das Vorhaben leistet damit einen Beitrag zur sicherheitsanalytischen Bewertung des Langzeitverhaltens von Salzformationen als Endlagerwirtsgestein.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP1: Laborative Untersuchungen zum Verhalten des verfestigten Salz-/Sorelbetons in Triaxialdruckversuchen mit Ermittlung des Kompaktionsverhaltens, der Permeabilitäts-Porositäts-Beziehung, der Dilatanz- bzw. Festigkeitsgrenze. Zusätzlich soll das langzeitige mechanische und hydraulische Verhalten in ein-/ triaxialen Kriechversuchen ermittelt werden. Durchführung weiterer Untersuchungen zur Bestimmung des HM Verhaltens des Systems Beton / Gebirge.

AP2: Prozessanalytische Modellierung: Auswahl geeigneter Stoffmodelle und Materialdaten, Nachprüfung der Anwendbarkeit der Salzmodelle für Salz-/ Sorelbeton, Bestimmung der Stoffmodellparameter aus den Laborversuchen, Kalibrierung und Validierung der ausgewählten Stoffmodelle durch Simulation typischer Laborversuche. Durchführung einer HM gekoppelten Modellrechnungen zur Prognose des Langzeitverhaltens eines Schachtverschlussystems im Salinar

AP3: Ergebniszusammenführung und Berichterstattung

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im 1. Hj. 2013 ist es gelungen Bohrkernmaterial aus Salzbeton aus einem Untertage Bauwerk zu beschaffen, das unter In-situ-Bedingungen errichtet und dem Gebirgsbeanspruchungszustand ausgesetzt wurde. Nachdem im geotechnischen Labor der GRS die Prüfkörperpräparation durchgeführt wurde, ist zunächst der Grad der Beanspruchung/Schädigung experimentell einzugrenzen, dem die Proben in situ durch die Spannungsumlagerungen des Gebirges im Zusammenhang mit dem Bau des Damms ausgesetzt worden sind. Weiterhin ist zu überprüfen, ob der Salzbeton ein signifikantes zeitabhängiges Deformationsverhalten besitzt und ob es im Baukörper in situ durch die Spannungsumlagerungen des Gebirges zu dem Aufbau eines „Versatzdruckes“ kommt und inwieweit dieser Zustand zeitlichen Veränderungen unterliegt.

Zunächst wurde mit klassischen einaxialen Kriechversuchen an 5 Proben parallel begonnen, bei denen neben der axialen und radialen Deformation zusätzlich die axiale Beanspruchung, die Temperatur sowie die Luftfeuchte online aufgezeichnet werden. Unter einer axialen Beanspruchung von 5 MPa zeigen alle Proben über einen Zeitraum von mehreren Wochen eine quasi stationäre Kriechdeformation in der Größenordnung von 10-10 1/s.

Im Vorlauf zu den experimentellen Untersuchungen mit dem Ziel die Beziehung zwischen Rekompaktion und Spannung sowie die Entwicklung der Porositäts-Permeabilitäts-Relation während der Rekompaktion der Proben zu ermitteln, wurde an einer Probe exemplarisch das Relaxationsverhalten unter in situ Spannungsrandbedingungen (nahezu isotrop) bestimmt. Es wurden neben der Messung von Deformation und Spannung auch punktuelle Gasdurchlässigkeitsmessungen durchgeführt. Die Probe zeigte unmittelbar nach Versuchsbeginn eine Gasdurchlässigkeit in der Größenordnung von 10-20 m<sup>2</sup> bis 10-21 m<sup>2</sup>. Bereits innerhalb von 24h nach Aufbringung einer nahezu isotropen Beanspruchung führte die aufgezeichnete Volumenkompaktion dazu, dass kein weiterer Gasfluss durch die Probe bei den gewählten Randbedingungen gemessen werden konnte. Während der anschließenden 4-wöchigen Standzeit des Relaxationsversuchs wurde eine stetige Zunahme der Volumenkompaktion aufgezeichnet. Weitere experimentelle Untersuchungen werden zeigen, ob der verwendete Salzbeton neben einer deviatorischen Belastung auch unter isotroper Beanspruchung ein grundsätzliches viskoses Materialverhalten zeigt.

Am 9.10.2013 hat auf Einladung der ANDRA in Saint-Dizier ein DOPAS Treffen stattgefunden, um die aktuellen Arbeitsergebnisse zu präsentieren und mit den Projektpartnern zu diskutieren.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Fortführung experimenteller Untersuchungen
- Durchführung erster orientierender modelltheoretischer Untersuchungen, Vergleich mit Messbefunden
- Dokumentation

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Czaikowski, O.; Presentation of the GRS work general status on ELSA (objectives, schedule, work progress, deliverables, perspectives) - Q&A. DOPAS WP2/3/4 Meeting, 8-10.10.2013, Saint-Dizier, France.

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11142</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Performance Assessment of Sealing Systems – Kurztitel: PASS		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Endlagersystem		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.09.2012 bis 31.08.2016	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2013 bis 31.12.2013	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 216.801,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Rübel	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Vorhaben PASS stellt die von der GRS im Rahmen des internationalen Vorhabens „Full Scale Demonstration of Plugs and Seals“ (DOPAS) durchzuführenden Arbeiten in den Tasks 5.2 und 5.3 des Arbeitspakets 5 dar. Das Projekt DOPAS findet im 7. Rahmenprogramm der Europäischen Union statt. Die GRS nimmt daran als maßgeblicher Partner teil und ist Arbeitspaketleiter des Arbeitspakets 5.

Die Arbeiten in PASS beziehen sich vor allem auf die Auswertung der experimentellen Arbeiten und Prozessmodellierungen im Rahmen der Projekte LAVA, LASA und THM-Ton sowie der Arbeiten der internationalen Projektpartner im Projekt DOPAS im Hinblick auf deren Verwertbarkeit zum Nachweis der Langzeitsicherheit.

Die wichtigsten Aspekte dabei sind die

- Identifizierung der für den Langzeitsicherheitsnachweis relevanten Prozesse, die
- Konzeptionierung von Modellen für integrierte Rechenprogramme, die
- Durchführung von integrierten Rechnungen für generische Endlager, die
- Durchführung von Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen zur Bestimmung der Robustheit des Endlagersystems in Bezug auf die geotechnischen Verschlussbauwerke und die
- Identifikation der verbleibenden Unsicherheiten.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP1: Verhalten des Verschlusssystems. Dieses Arbeitspaket beinhaltet die Arbeitsschritte: Stand von Wissenschaft und Technik zum Prozessverständnis, Prognose der Prozessabläufe über große Zeiträume und Identifikation relevanter Prozesse

AP2: Konzeptuelle Modelle und Prozessanalyse. Dieses Arbeitspaket beinhaltet die Arbeitsschritte: Review der nationalen und internationalen Standards und Bestimmungen und Entwicklung der konzeptuellen Modelle für die Wirtsgesteinstypen Salz und Tonstein

AP3: Langzeitsicherheitsanalytische Modelle und integrierte Analyse. Dieses Arbeitspaket beinhaltet die Arbeitsschritte: Implementierung, Integrierte Analyse und Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse

AP4: Projektleitung und Dokumentation

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP1: Weiterarbeit an der Erstellung der Beiträge für den Fragebogen zum Thema „Design Bases, Reference Designs and Performance Demonstration of Plugs and Seals“ gemeinsam mit DBETec auf Grundlage der im Projekt VSG erarbeiteten Referenzdesigns.  
Kommentierung und Diskussion des ersten Entwurfs des Deliverables D2.1 „Design Bases and Criteria“.
- AP2: Analyse der im Rahmen der VSG durchgeführten geomechanischen Rechnungen zum Verhalten der EDZ im Bereich der Schachtverschlusselemente im Hinblick auf die Verwertbarkeit dieser Rechnungen in PASS/DOPAS.  
Parametrisierung der Rechnungen durch ein Parameter Modell mit vier Variablen zur Beschreibung des EDZ-Verhalten in einem integrierten Modell. Fortsetzung der Analyse der unterschiedlichen bestehenden konzeptuellen Modelle zur Berücksichtigung der EDZ und der Betonkorrosion.  
Formulierung eines erweiterten mathematischen Modells zur Berücksichtigung der EDZ und der Betonkorrosion.
- AP3: Erstellung eines Fragebogens für den WP5 von DOPAS zur Erfassung der Relevanz der durchgeführten Arbeiten für den Safety Case.  
Beginn der Analyse der LOPOS-Segmentmodelle zur Planung, wie die zu berücksichtigenden Effekte in dem integrierten sicherheitsanalytischen Modell implementiert werden können.
- AP4: Durchführung eines DOPAS Arbeitstreffens am 11.09.2013 zur Abstimmung der Arbeiten der unterschiedlichen internationalen Projektpartner im Workpackage 5 über Performance Assessment.  
Teilnahme am DOPAS General Assembly Meeting am 10.12.2013.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1: Weitere Bearbeitung des unter „Durchgeführte Arbeiten“ genannten Fragebogens zur Design-Basis.
- AP2: Analyse der bisher in DOPAS bei den experimentellen Arbeiten erzielten Ergebnisse im Hinblick auf die Kompatibilität mit den bereits vorhandenen Kenntnisstand bzw. Ermittlung der Notwendigkeit von Erweiterungen am bisherigen konzeptuellen Modell.
- AP3: Erstellung eines ersten Strukturmodells zur Durchführung zukünftiger integrierter Rechnungen auf Basis des Endlager- und Verschlusskonzeptes der VSG.  
Beginn der Implementierung der zu berücksichtigenden Prozesse in die Segmentmodelle von LOPOS.  
Beginn der Erstellung des Deliverables D5.6, fällig Ende August.
- AP4: Organisation des WP5 in DOPAS als Arbeitspaketleiter und Unterstützung des Koordinators beim Erstellen der Berichte an die EU für die 1. Evaluierung.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<b>Auftragnehmer:</b> DBE Technology GmbH, Eschenstr. 55, 31224 Peine		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11152</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Prozess-Simulation zur Konzeption von Stütz- und Dichtelementen für Schachtverschlüsse (ProSiD)		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Endlagersystem		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.09.2012 bis 31.08.2016	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2013 bis 31.12.2013	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 297.778,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Jobmann	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Eine wesentliche Komponente in Verschlusskonzepten für Schächte ist eine Schottersäule, die durch ihre Setzungsstabilität als Stützelement für aufliegende Dichtelemente dient. Eine Alternative dazu wäre eine Füllsäule aus Salzgrus. Der Vorteil bei der Verwendung von arteigenem Material ist die Tatsache, dass man nicht nur eine Stützsäule hätte, sondern dass man zusätzlich auch von einer langfristigen Dichtwirkung dieser Säule Kredit nehmen kann. Durch die Konvergenz des Gebirges wird das Salzgrus weiter verdichtet und in seiner Durchlässigkeit reduziert. Um das zu erreichen, bedarf es einer bestmöglichen Verdichtbarkeit des arteigenen Materials sowie geeigneter Verdichtungsverfahren. Im Rahmen dieses Vorhabens soll anhand von Modellberechnungen zum einen untersucht werden, bei welcher Korngrößenverteilung eine bestmögliche In-situ-Verdichtbarkeit erreicht werden kann und zum anderen, welche verfahrenstechnischen Maßnahmen im Rahmen von In-situ-Verdichtungsprozessen eine bestmögliche Verdichtung erwarten lassen.

Zu diesem Zweck wird ein Partikelmodell entwickelt, mit dessen Hilfe unterschiedliche Korngrößen- bzw. Kornverteilungen generiert und ein Verdichtungsprozess simuliert werden kann. Es wird untersucht, welche Korngrößenverteilung die bestmögliche Verdichtbarkeit gewährleistet und welchen Einfluss unterschiedliche Verdichtungsverfahren auf das Verdichtungsergebnis haben. Abschließend wird die langfristige Kompaktion des Materials unter In-situ-Spannungsbedingungen simuliert und die Entwicklung relevanter Materialparameter wie z. B. die Porosität charakterisiert.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP1: Materialoptimierung

AP2: Verfahrensoptimierung



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

Die Anforderungen an das Design von Abdichtelementen sind für Salz, Tonstein und Kristallin als Wirtsgestein unterschiedlich. Besondere nationale Bedingungen sind z. B. in solchen Fällen zu berücksichtigen, in denen die nationalen Vorschriften besondere Designanforderungen zur Folge haben. Die Planungsgrundlagen zur Errichtung von Abdichtbauwerken sowohl für in-situ Tests als auch für tatsächliche Bauwerke in einem Endlager sollen dokumentiert werden. In diesem Zusammenhang wurde vom Projektpartner GSL die jeweiligen Anforderungen, die die anderen Projektpartner an ihre zu installierenden Testbauwerke (DOMPLU, SKB; POPLU, POSIVA; EPSP, SÚRAO; FSS, ANDRA; ELSA, DBETEC/TUBAF/GRS) stellen, zusammengetragen und in einem Bericht, zunächst im Entwurf, dokumentiert. Ergänzend wurden in diesen „Design Requirements Report“ auch Informationen über Design-Anforderungen aus anderen Ländern wie der Schweiz, den Niederlanden und England mit integriert

Die modelltheoretischen Arbeiten in diesem Vorhaben liefern grundlegende Informationen zur Material- und Einbauspezifikation einer Füllsäule als Stütz- und Abdichtkomponente. Es wurde ein Partikelmodell entwickelt, mit dessen Hilfe unterschiedliche Korngrößen- bzw. Partikelverteilungen generiert und ein Verdichtungsprozess simuliert werden kann.

Zur Ermittlung, bei welcher Korngrößenverteilung eine bestmögliche Verdichtbarkeit von Salzgrus erreicht werden kann und welche verfahrenstechnischen Maßnahmen eine bestmögliche Verdichtung erzielen, werden numerische Simulationen durchgeführt. Zwei grundsätzliche Methoden werden in diesem Zusammenhang analysiert: die Impulsverdichtung und die Rüttelverdichtung. Das Prinzip der Impulsverdichtung besteht darin, dass ein Stempel mehrmals auf die Abdeckplatte der Partikelprobe fallengelassen wird. Bei der Methode der Rüttelverdichtung werden horizontale Schwingungen einer so genannten Rüttelmaschine auf die zu verdichtende Probe übertragen. Anhand der verbleibenden Porosität innerhalb der Probe wird der jeweilige Verdichtungsgrad bestimmt. Im Berichtszeitraum konnte das Modell zur Impulsverdichtung fertiggestellt werden. Das Modell befindet sich zurzeit in der Testphase.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Fortführung der Modellentwicklung zur Analyse der beiden unterschiedlichen Verdichtungsmethoden Impulsverdichtung und Rüttelverdichtung auf den erreichbaren Verdichtungsgrad einer Probe.

Durchführung numerischer Analysen zum Einfluss der Verdichtungsmethode auf den erreichbaren Verdichtungsgrad des Materials.

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

White, M., Doudou, S., Neall, F. (2013): Design Basis and Criteria, DOPAS Work Package 2, Deliverable D-2.1, GSL, UK, (Draft version under review).

<b>Auftragnehmer:</b> DBE Technology GmbH, Eschenstr. 55, 31224 Peine	<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11162</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Studie zur Partitionierung und Transmutation (P&T) hochradioaktiver Abfälle	
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Querschnittsthemen mit Bezug zur Endlagerung	
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.09.2012 bis 15.10.2013	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2013 bis 15.10.2013
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 30.838,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Bollingerfehr

### 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

In der Studie, die aus zwei Teile bestehen soll, werden im ersten Teil die wissenschaftlichen und technologischen Aspekte der Technologieoption Partitionierung und Transmutation (P&T), die einen Beitrag zum nuklearen Abfallmanagement leisten könnte, dargestellt. Parallel dazu, werden in einem zweiten Teil die sozialwissenschaftlichen, ökologischen und ökonomischen Gesichtspunkte analysiert und schließlich beide Teile zusammengeführt. Ziel der Arbeit ist es, erstens den Stand von Wissenschaft und Technik, zweitens das Potential sowie die Chancen und Risiken dieser Technologien detailliert herauszuarbeiten. Hierfür werden mehrere Szenarien entwickelt und miteinander verglichen. Ein wesentlicher Aspekt ist es, zu analysieren welche Relevanz und welche Auswirkungen P&T auf die Entsorgung und Endlagerung von ausgedienten Brennelementen haben kann, hier insbesondere gezielt auf deutsche Verhältnisse. Die Arbeiten werden in zwei Modulen durchgeführt. Das Modul A befasst sich mit den wissenschaftlichen und technologischen Aspekten im Zusammenhang mit P&T (von den Grundlagen bis hin zu der anwendungsorientierten Forschung und Entwicklung).

DBE TECHNOLOGY GmbH soll dazu Beiträge zum Stand von Wissenschaft und Technik der Endlagerung für die Arbeiten zum Modul A liefern.

### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Ausgangspunkt und Randbedingungen
- AP2: Festlegung und Ausarbeitung der Szenarien
- AP3: Anforderungen und Herausforderungen für Partitionierung und Transmutation
- AP4: Stand der Grundlagen- und technologischen Forschung
- AP5: Sicherheitsaspekte
- AP6: Internationale Projekte
- AP7: Kompetenzen in Deutschland

DBE TECHNOLOGY GmbH liefert im Modul A Beiträge zum AP1, AP2 und AP5.

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Das Vorhaben wurde abgeschlossen und gemeinsam mit GRS (Braunschweig) ein Abschlussbericht erstellt, der die wesentlichen Auswirkungen einer angenommenen Anwendung von P&T in Deutschland auf Endlagerauslegung und Langzeitsicherheit zusammenfasst. Nachfolgend sind einige Schlussfolgerungen daraus zusammengefasst.

Ein Endlager für wärmeentwickelnde Abfälle ist auch bei Nutzung der Technologieoption P&T erforderlich für die heute bereits existierenden Wiederaufarbeitungsabfälle und die abgebrannten Brennelemente aus den Versuchs- und Prototypkraftwerken sowie Forschungsreaktoren, für die wärmeentwickelnden Abfälle aus der für P&T erforderlichen Wiederaufarbeitung sowie für zusätzliche Hülsen und Strukturteile aus der Zerlegung der Brennelemente und aus der letzten Beladung des Transmuters. Die Hälfte (bei Streckenlagerung) oder zwei Drittel (bei Bohrlochlagerung) der bisher in einer vorläufigen Sicherheitsanalyse geplanten Gesamtendlagerfläche bleibt von P&T gänzlich unberührt. Die Angabe eines „Endlager-Footprints“ (Gesamt-flächenbedarf des Endlagers inklusive Infrastrukturbereich mit den Schächten und Werkstätten unter Tage sowie weiteren für den Endlagerbetrieb benötigten Grubenbauen) ist nur für den Vergleich von Endlagern mit wärmeentwickelnden Abfällen sinnvoll. Durch P&T nimmt der Footprint eines Endlagers mit wärmeentwickelnden Abfällen um maximal 50 % ab. Durch den Betrieb (rund 150 Jahre) von P&T-Anlagen würden ca. 100.000 m<sup>3</sup> sogenannter Sekundärabfälle (radioaktiven Abfälle mit vernachlässigbarer Wärmeentwicklung) anfallen, für die aller Voraussicht nach ein zusätzliches Endlager geplant, errichtet und betrieben werden müsste.

Für Endlager in Salz ergeben sich für den Lösungspfad in den bisher vorliegenden Modellrechnungen des Vorhabens VSG keine relevanten Freisetzungen von Radionukliden. Dann ist von P&T auch kein Vorteil zu erwarten. Bei der Freisetzung von gasförmigen und leicht flüchtigen Radionuklidverbindungen sind im Vorhaben VSG geringe Konsequenzen gemäß der vereinfachten radiologischen Langzeitaussage für den Rand des einschlusswirksamen Gebirgsbereichs errechnet worden. Hier ist für ein Endlager mit wärmeentwickelnden Abfällen bei Berücksichtigung von P&T zu erwarten, dass weniger dieser Radionuklide freigesetzt werden, da insgesamt weniger dieser Radionuklide in den Abfällen vorhanden sind oder weil sie nach der Abtrennung in einer stabilen Matrix gebunden werden können. Durch P&T werden hauptsächlich Radionuklide transmutiert, die sich in bisherigen Transportrechnungen als für die Langzeitsicherheit von Endlagern in Deutschland weniger relevant gezeigt haben. Die Mengen der in den Langzeitsicherheitsanalysen relevanten Spalt- und Aktivierungsprodukte werden durch eine Nutzung von P&T nicht verringert, sondern gegebenenfalls sogar vergrößert. Vor allem bei den Endlagern in Ton müssen zur Beurteilung der Konsequenzen von P&T auch das Endlager mit den Sekundärabfällen aus P&T betrachtet werden. Eine gemeinsame Einlagerung von wärmeentwickelnden und vernachlässigbar wärmeentwickelnden Abfällen in einem gemeinsamen Endlager ist aber aus Gründen der Langzeitsicherheit wenig sinnvoll.

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

Keine.

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

Partitionierung und Transmutation. Forschung – Entwicklung – Gesellschaftliche Implikationen. Hrsg. Ortwin Renn. STUDIE der Deutschen Akademie der Technikwissenschaften (acatech). Entwurf: Oktober 2013.

Auswirkungen von Partitionierung und Transmutation (P&T) auf Endlagerkonzepte und Langzeitsicherheit von Endlagern für wärmeentwickelnde radioaktive Abfälle. Gemeinsamer Abschlussbericht von DBETEC und GRS. Entwurf, November 2013.

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln	<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11172</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Studie zur Partitionierung und Transmutation (P&T) hochradioaktiver Abfälle	
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Querschnittsthemen mit Bezug zur Endlagerung	
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.09.2012 bis 15.10.2013	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2013 bis 15.10.2013
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 40.072,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Mönig

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

In dem Vorhaben sollen der Stand von Wissenschaft und Technik und das Potential sowie die Chancen und Risiken von P&T detailliert herausgearbeitet werden. Hierfür werden Szenarien entwickelt und miteinander verglichen. Ein wesentlicher Aspekt ist dabei die Analyse, welche Relevanz und welche Auswirkungen P&T auf die Entsorgung und Endlagerung von radioaktiven Abfällen haben kann, insbesondere bezüglich der deutschen Verhältnisse. Ferner soll betrachtet werden, welche Beiträge Deutschland in einem europäisch angelegten P&T-Forschungskonzept leisten könnte. In diesem Zusammenhang werden auch die Aspekte der Förderung und Erhaltung der Kompetenzen in der deutschen Nuklearforschung sowie der Transfer von P&T-Technologien in nicht-nukleare Anwendungsbereiche evaluiert und dargestellt. Die Machbarkeit großtechnischer Partitionierungs- und Transmutationsanlagen unter Berücksichtigung verschiedener Teilaspekte (Abtrennungsverfahren, Brennstoffentwicklung, Beschleunigerkonzepte, usw.) soll beurteilt werden. Ferner ist die Bewertung dieser Technologie in Hinblick auf verschiedene Entsorgungsstrategien (mit Berücksichtigung von Aspekten wie mehrfache Wiederaufarbeitung der ausgedienten Brennelemente, entsprechende Transporte, erhöhtes Aufkommen von zusätzlichen Abfallformen, notwendige Zwischenlagerung und Endlagerung, etc.) Bestandteil dieses Vorhabens. Das Vorhaben wird von acht Institutionen in zwei fachlich unterschiedlich orientierten Modulen durchgeführt. Die GRS Braunschweig ist in die Arbeiten im Modul A und darin in die Bewertung von P&T bezüglich der Auswirkungen auf die langzeitsichere Endlagerung der radioaktiven Abfälle eingebunden.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Ausgangspunkt und Randbedingungen
- AP2: Festlegung und Ausarbeitung der Szenarien
- AP3: Anforderungen und Herausforderungen für Partitionierung und Transmutation
- AP4: Stand der Grundlagen- und technologischen Forschung
- AP5: Sicherheitsaspekte
- AP6: Internationale Projekte
- AP7: Kompetenzen in Deutschland

GRS Braunschweig ist bei den Arbeitspaketen 1, 2 und 5 beteiligt.

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

Die Arbeiten der GRS betrafen im Berichtszeitraum Abstimmungen und Anmerkungen zum Abschlussbericht. Am 24.10.2013 wurden die Projektergebnisse vor BMU- und BMWi-Vertretern in Berlin präsentiert.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Die Arbeiten der GRS Braunschweig für den Abschlussbericht (STUDIE) sind beendet.

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

Partitionierung und Transmutation. Forschung – Entwicklung – Gesellschaftliche Implikationen. Hrsg. Ortwin Renn. STUDIE der Deutschen Akademie der Technikwissenschaften (acatech). Entwurf: Oktober 2013.

Auswirkungen von Partitionierung und Transmutation (P&T) auf Endlagerkonzepte und Langzeitsicherheit von Endlagern für wärmeentwickelnde radioaktive Abfälle. Gemeinsamer Abschlussbericht von DBETEC und GRS. Entwurf, November 2013.

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln	<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11182A</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Sicherheitsanalytische Untersuchungen für ein Endlager für radioaktive Abfälle in einer diagenetisch überprägten Tonformation in der Nachbetriebsphase - SANToS	
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Querschnittsthemen mit Bezug zur Endlagerung	
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.11.2012 bis 31.01.2016	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2013 bis 31.12.2013
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 537.700,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Rübel

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Im Rahmen der wissenschaftlich-technischen Zusammenarbeit von in Fragen der Endlagerung zwischen ROSATOM und dem Bundesministerium für Wirtschaft und Technologie (BMWi) soll im Themengebiet zur „*Sicherheitsanalyse von Endlagern in oberflächennahen Tonformationen in der Nachbetriebsphase*“ die Überprüfung der Datengrundlage und des Instrumentariums zur Durchführung einer Sicherheitsanalyse für ein Endlager für radioaktive Abfälle in einer diagenetisch überprägten Tonformation durchgeführt werden.

Das auf der Grundlage der lokalen russischen geologischen und hydrogeologischen Verhältnisse entwickelte Endlagerkonzept wird mit den im Rahmen deutscher Forschungsprojekte (z. B. AnSichT) entwickelten Konzepten mit dem Ziel verglichen, ggf. Möglichkeiten zur Optimierung des deutschen Sicherheitsnachweiskonzeptes aufzuzeigen. Die Übertragbarkeit von Erfahrungen, Ergebnissen, Interpretationen und Daten aus dem russischen Konzept auf Deutschland wird geprüft.

Die gemeinsame Bearbeitung durch BGR, GRS und DBE TECHNOLOGY soll eine ausgewogene und vollständige Betrachtung aller Instrumentarien gewährleisten.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Projektkoordination
- AP2: Review der geologischen Gesamtsituation und ergänzende Gesteinsuntersuchungen
- AP3: Systemanalyse
- AP4: Verschlusskonzept und Nachweisführung
- AP5: Berechnungen zur Radionuklidenausbreitung
- AP6: Berichtswesen

GRS ist federführend für das Arbeitspaket 5. Dieses gliedert sich in die Unteraufgaben:

- AP5.1: Indikative Berechnungen mit generischen Modellen
- AP5.2: Berechnungen mit präzisierten Modellen
- AP5.3: Variationsrechnungen

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

Es wurden im Berichtszeitraum organisatorische Arbeiten zur Projektplanung durchgeführt. Da sich der Beginn der von russischer Seite vorgesehenen Arbeiten bzgl. eines Endlagers im Leningrader Gebiet verzögert, wurden auch die wissenschaftlichen Arbeiten der GRS bisher nur in geringem Umfang durchgeführt.

AP5: Es wurden grundsätzliche Überlegungen zum Sicherheitskonzept im Hinblick auf die Ausbreitung kohlenstoffhaltiger radioaktiver Gase vorgenommen.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Es ist geplant, die Arbeiten zum Sicherheitskonzept auszuweiten und jene zur Nachweisführung zu beginnen. Dies umschließt die Zusammenstellung der Daten zum Standortmodell, der Abfallspezifikation und dem Endlagerkonzept, sowie die Erarbeitung einer Liste für das Endlager relevanter Eigenschaften und Prozesse (FEP).

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

Keine.

<b>Auftragnehmer:</b> DBE Technology GmbH, Eschenstr. 55, 31224 Peine	<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11182B</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Sicherheitsanalytische Untersuchungen für ein Endlager für radioaktive Abfälle in einer diagenetisch überprägten Tonformation in der Nachbetriebsphase - SANToS	
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Querschnittsthemen mit Bezug zur Endlagerung	
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.11.2012 bis 31.01.2016	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2013 bis 31.12.2013
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 352.065,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Krone

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Von russischer Seite wird zurzeit geprüft, ob ein Endlager in einer diagenetisch überprägten Tonsteinformation errichtet werden kann. Im Rahmen dieses Vorhabens werden sicherheitstechnische Teilaspekte erarbeitet, die zu einem späteren Zeitpunkt zu einer Bewertung von Standorten in Tonformationen beitragen können. Das besondere Interesse an den gemeinsamen Arbeiten ist darin begründet, dass es im Rahmen des Vorhabens auf der Grundlage realer Erkundungsdaten möglich ist, sicherheitsanalytische Instrumentarien zu testen und ihre Übertragbarkeit auf andere Regionen bzw. Standorte zu bewerten.

Es wird ein Review der geologischen Gesamtsituation durchgeführt. Darauf aufbauend soll ein geologisches Standortmodell erstellt werden, das als Grundlage sowohl für die Entwicklung eines Verschlusskonzeptes, als auch für die Prognose der geologischen Langzeitentwicklung dient. Ausgehend von der Strukturierung des FEP-Kataloges, der im FuE-Vorhaben AnSichT erarbeitet wird, soll ein spezifischer FEP-Katalog entworfen und die Prozesse selektiert werden, die für eine Endlagerung in den Tonsteinformationen der zu untersuchenden Region relevant sind. Abschließend soll mittels Berechnungen zur Radionuklidenausbreitung die Isolationswirkung der Gesamtsystems bestehend aus der geologischen und den geotechnischen Barrieren analysiert und bewertet werden.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Projektkoordination
- AP2: Review der geologischen Gesamtsituation und ergänzende Gesteinsuntersuchungen
- AP3: Systemanalyse
- AP4: Verschlusskonzept und Nachweisführung
- AP5: Berechnungen zur Radionuklidenausbreitung
- AP6: Berichtswesen

Die DBE TECHNOLOGY GmbH ist federführend beteiligt an den Arbeitspaketen 1, 3, 4 und 6.



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

Auf Grund von öffentlichen Diskussionen in der Region des potenziellen Endlagerstandortes in Russland konnten von russischer Seite die Projektarbeiten noch nicht aufgenommen werden. Aus diesem Grund wurden die Projektarbeiten auf deutscher Seite weiter auf Planungsarbeiten beschränkt.

Zur Fortführung des Vorhabens wurde anlässlich des Expertentreffens von ROSATOM und BMWi zur wissenschaftlich-technischen Zusammenarbeit auf dem Gebiet der friedlichen Nutzung der Kernenergie Ende Juli in Moskau vereinbart, dass darüber nach der für Ende des Jahres (27.12.2013) geplanten öffentlichen Anhörung entschieden wird.

Informationen darüber sind zurzeit noch nicht bekannt.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Aufnahme der Projektarbeiten.

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

Keine.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Technische Universität Bergakademie Freiberg, Akademiestr. 6, 09599 Freiberg		<b>Förderkennzeichen:</b>  <b>02 E 11193A</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Schachtverschlüsse für Endlager für hochradioaktive Abfälle (ELSA – Phase II): Konzeptentwicklung für Schachtverschlüsse und Test von Funktionselementen von Schachtverschlüssen		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Endlagersystem		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.05.2013 bis 31.12.2015	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2013 bis 31.12.2013	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 1.293.954,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Kudla	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

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

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP1: Referenz für die Standortoption "Ton" ist die Nordregion. Eine Referenzgeologie für einen Standort "Steinsalz – Flache Lagerung" liegt vor.
- AP2: Die In-situ-Versuche für die Option "Steinsalz" finden im Bergwerk Sondershausen (GSES) statt. Für die Option "Ton" steht kein Standort zur Verfügung.  
Die Planungen für alle halbtechnischen Versuche des AP4 liegen vor.
- AP3: Vorschlag einer empirisch und numerisch für eine hohe Packungsdichte optimierten Salzgrusmischung (Miximalkorngröße 10 mm) aus maximal 4 Einzelfraktionen. Die geringsten Restporositäten werden bei Zugabe von etwa 15 Masse-% Tonmehl und einer Wasserzugabe von 4 Masse-% erreicht. Bei spezifischen Verdichtungsenergien von 3 bis 5 MJ/m<sup>3</sup> können mit Ton-reichen Gemischen Restporositäten von ca. 11 % erreicht werden. Geringere Restporositäten < 9 % erreicht man nur mit Ton- und Wasser-ärmeren Gemischen und bei sehr hohen Verdichtungsenergien von ca. 15 MJ/m<sup>3</sup>. Alternativ dazu können binäre Gemische aus NaCl-Briketts (20 cm<sup>3</sup> Nennvolumen) und einer Salzgrus-Ton-Feinfraktion ohne Zugabe von Wasser mit einer Rüttelplatte auf eine Einbaudichte von 1,95 g/cm<sup>3</sup> verdichtet werden.
- AP4: Im Ergebnis der Vorerkundung der zukünftigen Versuchsorte im Steinsalz wurden in einer Erkundungsbohrung an drei Messpunkten Permeabilitäten von 10-22 bis 10-20 m<sup>2</sup> gemessen.  
Bei der Firma TerraMix (Österreich) wurde ein halbtechnischer Versuch zur Verdichtung eines Salzgrus-Ton-Gemisches mit einem 9 t – Fallgewicht bei einer Fallhöhe von 1,2 m durchgeführt. Der Versuch musste nach 40 Schlägen beendet werden, konnte aber ausgewertet werden.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1: Diskussion über die Notwendigkeit eines zusätzlichen Widerlagers aus Beton. Erster Entwurf eines Gesamtkonzeptes je Wirtsgesteinsoption.
- AP2: Abschluss der Anpassung der Versuchsplanung.
- AP3: Optimierung des Ton- und Wassergehaltes der Salzgrusmischungen.  
Versuche zur Entwicklung einer neuen Asphaltrezeptur für Schachtverschlüsse.
- AP4: Halbtechnische Versuche zu Salzgruselementen, MgO-Beton, Asphalt- und Bitumen-dichtungen sowie Bentonitdichtsystemen mit Äquipotentialsegmenten.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Knorr, P.: Möglichkeiten des Einsatzes der Impulsverdichtung für den Einbau einer Füllsäule aus Salzgrus als Schachtverschlusselement. Studienarbeit – Studienrichtung Bergbau, TU Bergakademie Freiberg, Juli 2013.

<b>Auftragnehmer:</b> DBE Technology GmbH, Eschenstr. 55, 31224 Peine		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11193B</b>	
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Schachtverschlüsse für Endlager für hochradioaktive Abfälle (ELSA – Phase II): Konzeptentwicklung für Schachtverschlüsse und Test von Funktionselementen von Schachtverschlüssen			
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Endlagersystem			
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.05.2013 bis 31.12.2015		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2013 bis 31.12.2013	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 597.233,00 EUR		<b>Projektleiter:</b> Jobmann	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

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

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Das ELSA-Vorhaben hat Anknüpfungspunkte an das derzeit laufende FuE-Vorhaben *AnSichT* (Methodik und Anwendungsbezug eines Sicherheitsnachweiskonzeptes für ein HAW-Endlager im Tonstein - 02 E11061A). Es wurde in Absprache mit dem Projektpartner festgelegt, dass das Vorhaben ELSA-II auf die dort entwickelten geologischen Modelle aufbaut und die geplanten Konzeptionen für Schachtverschlüsse daran orientiert. Im Gegenzug wird in dem Vorhaben *AnSichT* das in ELSA-II entwickelte Schachtverschlusskonzept als Referenzkonzept übernommen.

Im Zusammenhang mit der Entwicklung von Dichtelementen, die aus Bitumen oder Asphalt bestehen, ist seitens der DBE TECHNOLOGY GmbH geplant, ein Stoffgesetz für das Programmsystem FLAC3D zu entwickeln, mit dessen Hilfe das physikalische Verhalten dieser Materialien simuliert werden kann. Die Möglichkeit der Simulation wird zur Führung eines rechnerischen Sicherheitsnachweises benötigt. Es wurde mit einer Recherche zum Materialverhalten verschiedener Bitumina und Asphalte sowie mit der Zusammenstellung des zugehörigen Datenmaterials zur Erstellung der zu implementierenden Stoffgesetze begonnen. Parallel dazu wurde damit begonnen, eine Programmroutine zu entwickeln und zu testen, mit deren Hilfe das Materialverhalten rechnerisch abgebildet werden kann.

Das Vorhaben ELSA stellt den deutschen Beitrag zur europäischen Technologieplattform "Implementing Geological Disposal – Technology Plattform" (IGD-TP) dar. Es ist vorgesehen, dass die ELSA-Arbeiten in angemessenem Umfang in das von der europäischen Kommission geförderte Vorhaben DOPAS einfließen. Aus diesem Grund wurden zwei Technische Berichte in englischer Sprache erstellt. Darin werden zum einen die Anforderungen an Schachtverschlüsse dokumentiert und zum anderen das Sicherheits- und Nachweiskonzept zum Integritätsnachweis von Verschlusskomponenten erläutert und an Beispielen gezeigt. Beide Berichte wurden den DOPAS Partnern auf der projektinternen Website zur Verfügung gestellt.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1: Entwicklung von prinzipiellen Schachtverschlusskonzepten für Endlagerstandorte in Tonstein in Deutschland auf Basis der Endlagerstandortmodelle, die im Rahmen des Vorhabens *AnSichT* erarbeitet wurden.
- AP5: Fortführung der Arbeiten zur rechnerischen Simulation des Materialverhaltens von Bitumen und Asphalt.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

- Herold, P., & Müller-Höppe, N. (2013). Safety demonstration and verification concept - Principle and application examples -. Technical Report, DBE TECHNOLOGY GmbH.
- Jobmann, M. (2013). Requirements for shaft seals for HLW repositories in Germany. Technical Report, DBE TECHNOLOGY GmbH.

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln	<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11203A</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Stabilität von kompaktiertem Bentonit zur Rückhaltung von Radionukliden in geklüfteten Systemen – Experimente und Modellierung, KOLLORADO-e	
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Querschnittsthemen mit Bezug zur Endlagerung	
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.03.2013 bis 29.02.2016	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2013 bis 31.12.2013
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 266.200,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Noseck

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

Hauptziel des Vorhabens ist es, ein verbessertes Verständnis der Radionuklid-Kolloid und Kolloid-Gesteinsoberflächen Wechselwirkung und der zugrundeliegenden Mechanismen unter naturnahen Bedingungen am Beispiel geklüfteter Granitsysteme zu erreichen und auf dieser Basis die Relevanz des kolloidgetragenen Radionuklidtransports hinsichtlich der Langzeitsicherheit eines Endlagers in einer Hartgesteinsformation zu bewerten. Darüber hinaus werden generische Aussagen zur Kolloidrelevanz erarbeitet. Der Beitrag des INE konzentriert sich auf experimentelle Arbeiten im Labor und in Untertagelabors sowie die begleitende Erstellung von Strömungs- und Transportmodellen. Die Arbeiten der GRS fokussieren sich auf die Anwendung und Qualifizierung von Rechenprogrammen für die Langzeitsicherheitsanalyse. Im vorliegenden Bericht werden die Arbeiten der GRS beschrieben.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Experimentelles Programm zum kolloidgetragenen RN-Transport (INE)
- AP1.1: Mechanismen der Kolloid-RN-Kluftmineral-Wechselwirkung
- AP1.2: Kolloidgetragene Radionuklid-Migration
- AP2: Modellrechnungen zum kolloidgetragenen RN-Transport (GRS/INE)
- AP2.1: Simulationsrechnungen für weitere CFM Homolog/RN Experimente (GRS)
- AP2.2: Simulationsrechnungen für Mock-Up Test und integriertes CFM Experiment (GRS)
- AP2.3: Bewertung des kolloidgetragenen RN Transports (GRS)
- AP2.5: Simulation von Strömungs- und Transportvorgängen im Kristallingestein (INE)
- AP3: Integration der Ergebnisse und Abschlussdokumentation (GRS/INE)

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP2: Durchführung von Simulationsrechnungen für den Tracertransport in Feldexperimenten 12-03 bis 12-06 zur Analyse des Strömungsverhaltens in anderen Dipolen. Diese Experimente dienten der Charakterisierung und Identifizierung eines geeigneten Dipols für das zweite Radionuklid-Experiment.  
Erstellung eines neuen geometrischen Modells zur Simulation des zweiten Radionuklidfeldexperiments CFM RUN13-05 und Beginn von Simulationsrechnungen zur Vorhersage des Transports auf Basis der bisherigen Ergebnisse zum Verhalten eines idealen Tracers und zu den Wechselwirkungen zwischen Radionukliden, Kolloiden und Kluffüllmaterial.  
Durchführung von langzeitsicherheitsanalytischen Rechnungen für ein Endlager in Granit (für ausgewählte Szenarien des neuen Safety Case von POSIVA) mit dem im Projekt ADEMOS (FKZ 02E10367) neuentwickelten Rechenprogramm GEOTREND-FC, das den eindimensionalen, kolloidgetragenen Schadstofftransport durch offene Klüfte mit Matrixdiffusion der Schadstoffe berücksichtigt.
- AP3: Beginn der Dokumentation der Modellgrundlagen und der Simulationsergebnisse des Tracer- und Homologtransports für die Versuche 08-02, 10-01, 10-03 und 12-02 gemeinsam mit allen Modellierer-Gruppen.  
Beginn der Dokumentation der Ergebnisse für die Rechnungen mit GEOTREND-FC zur Veröffentlichung in einer Fachzeitschrift.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- AP2: Weiterführung der Simulationsrechnungen zum zweiten Radionuklidfeldexperiments CFM RUN13-05 und Vergleich der vorhergesagten Ergebnisse mit den experimentellen Daten.  
Durchführung von orientierenden Rechnungen für das integrierte Experiment mit Freisetzung von Kolloiden und Radionukliden aus einer eingebauten, dotierten Bentonitquelle.  
Weiterführung der langzeitsicherheitsanalytischen Rechnungen für ein Endlager in Granit (für ausgewählte Szenarien des neuen Safety Case von POSIVA) mit dem Rechenprogramm GEOTREND-FC. Durchführung von Parametervariationen und Dokumentation.
- AP3: Weiterbearbeitung und Fertigstellung des gemeinsamen Berichts zu den Grundlagen der Modelle und Simulationsergebnissen der Modellierer-Gruppen aus Schweden, USA und Deutschland.  
Erstellung einer Veröffentlichung zu den Simulationsergebnissen für die Homolog- und Radionuklidexperimente in einer Fachzeitschrift.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Hermann-von-Helmholtz-Platz 1, 76344 Eggenstein-Leopoldshafen		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11203B</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Stabilität von kompaktiertem Bentonit zur Rückhaltung von Radionukliden in geklüfteten Systemen – Experimente und Modellierung, KOLLORADO-e		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Querschnittsthemen mit Bezug zur Endlagerung		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.03.2013 bis 29.02.2016	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2013 bis 31.12.2013	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 1.030.253,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Schäfer	

### 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Der Kenntnisstand zur Kolloidproblematik, speziell zur Prognostizierbarkeit des Kolloidquellterms, der Kolloidstabilität und Kolloid- Mineraloberflächen- Wechselwirkung unter Einbezug der Oberflächenrauigkeit hat in den letzten Jahren nicht zuletzt durch das Vorgängerprojekt KOLLORADO-2 sehr große Fortschritte gemacht. Neben der Beschreibung der Kolloidstabilität mittels elektrostatischer Ansätze sind quantitative Daten zur Erosion der Bentonitbarriere generiert worden. Alle Daten zum kolloidgetragenen Radionuklidtransport weisen auf eine starke Abhängigkeit der Kolloidmobilität von der Kluftgeometrie/Oberflächenrauigkeit hin, wobei die vollständige Dissoziation vierwertige Actinide von der Tonkolloidoberfläche nach wie vor eine offene Fragestellung ist. Hauptziel des Anschlussvorhabens ist es weiterhin, das mechanistische Verständnis der Erosion des kompaktierten Bentonits und der Radionuklid-Kolloid Wechselwirkungen unter naturnahen Bedingungen zu verbessern und die Relevanz des kolloidgetragenen Radionuklidtransports hinsichtlich der Langzeitsicherheit eines Endlagers in einer Hartgesteinsformation zu bewerten. Darüber hinaus werden generische Aussagen zur Kolloidrelevanz erarbeitet. Der Beitrag des INE, auf den sich der vorliegende Bericht bezieht, konzentriert sich auf experimentelle Arbeiten im Labor und im Untertagelabor Grimsel sowie die begleitende Erstellung hydraulischer und kleinskalig reaktiver Transport- Modelle. Diese INE Arbeiten sind auch in das EU-Projekt CP BelBaR eingebunden ([www.belbar.eu](http://www.belbar.eu)). Die Arbeiten der GRS fokussieren auf die Weiterentwicklung und Anwendung von Rechenprogrammen für die Langzeitsicherheitsanalyse.

### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Folgende Arbeiten wurden im Berichtszeitraum durchgeführt:

AP1.1: Status: Im zweiten Halbjahr 2013 wurden Arbeiten zur Untersuchung des Erosionsverhaltens der Bentonite begonnen. Dazu wurde ein kompaktierter Bentonitring in einem Plexiglas Reaktor mit einer 1 mm Apertur 30 Tage Grimsel Grundwasser mit einer Fließgeschwindigkeit von  $10^{-5}$  m/s ausgesetzt (ohne Zusatz weiterer Tracer). Dies führte zur Bildung einer Halo-förmigen Gelschicht um den Pressling mit einem Durchmesser von ca. 1.5-2 cm. Nach Ende des Versuchs wurde die Erosionsstruktur zur mineralogischen Charakterisierung umfassend beprobt. Dazu wurden entlang mehrerer Traversen jeweils 10–12 Proben zur röntgendiffraktometrischen



und infrarotspektroskopischen Untersuchung entnommen. Erste Ergebnisse zeigen, dass nicht nur die Tonminerale (Smectite) in die Gelschicht hinein migrieren, sondern auch die akzessorische Minerale Feldspäte und Quarz. Lichtstreuungsexperimente und Elektronenmikroskopie sollen klären, ob dies auf Korngrößeneffekte zurückzuführen ist. Parallel zu dem oben aufgeführten Ringexperiment läuft ein zweiter Erosionsversuch in einem baugleichen Reaktor. In dem verwendeten Bentonitring sind seitlich 8 Glasampullen, gefüllt mit einem Gemisch aus Ni-Montmorillonite, Uranin, Eu, Th, Hf und Tb eingebracht. Zusätzlich ist in diesem Reaktor ein Druckfühler (gekoppelt an einen PC) verbaut, um die Druckentwicklung im Verlauf des Experiments online zu messen und auf zu zeichnen. Nach einem schnellen initialem Druckaufbau auf 26 bar stellte sich im weiteren Verlauf des Erosionsexperimentes ein Gleichgewichtsdruck nach Ausbildung der Gelschicht zwischen 17 und 18 bar ein. Das Eluat des Reaktors wird regelmäßig beprobt und auf Ionenzusammensetzung, pH-Wert, Fluoreszenz, Kolloidgröße und -konzentration via LIBD untersucht. Die in dem Erosionsversuch generierten Kolloidsuspensionen sollen anschließend in Radionuklidsorptions- und reversibilitätsversuchen Verwendung finden. Weitere Aktivitäten fokussierten sich im Allgemeinen auf die Wechselwirkungskräfte zwischen Kolloiden und Mineraloberflächen. Der Hauptschwerpunkt lag hierbei auf der Untersuchung der unterschiedlichen Reaktivität der Aluminol- und Silanolgruppen an den Kanten der Tonkolloidplättchen. Hierzu wurden  $\text{Al}_2\text{O}_3$  und  $\text{SiO}_2$  Partikel als Modellsubstanzen an die Spitze des AFM- Cantilevers präpariert, um die Kräfte gegenüber unterschiedlichen Mineraloberflächen (Biotite, Plagioklas, K-Feldspat, Quarz) als Funktion von pH und Eu(III) Konzentration zu messen. Die exakte Quantifizierung der ermittelten Kräfte und deren Vergleich mit Modellansätzen ist momentan in Arbeit.

AP1.2: Status: Schwerpunkt der Arbeiten im 2. Halbjahr 2013 lag (a) in der Durchführung des zweiten Radionuklidmigrationsexperimentes im Grimsel- Felslabor (Run 13-05) und (b) Laborstudien zur Machbarkeit der Radionuklidmarkierung für die Platzierung des kompaktierten Bentonits im „long term in situ Test“.

- Die Analytik des Radionuklidexperimentes Run 13-05 ist weitgehend abgeschlossen und die Daten zusammengefasst. Run 13-05 wurde im identen Dipol des CRR- Experiments durchgeführt, allerdings unter höheren Verweilzeiten. Alle eingesetzten Radionuklide waren mobil und konnten im Eluat gemessen werden. Die quantitative Analyse (Wiedererhalte) der Kolloidmessungen via LIBD und s-Kurven LIBD sowie der Actiniden mittels HR-ICP-MS ist derzeit noch im Gange. Weitere Messungen mittels AMS an Proben sind für Februar 2014 in Wien geplant.
- Die Arbeiten zum Einbringen einer Radionuklid-gespickten Bentonitpaste in einen kompaktierten Bentonitring mittels Glasampullen mit Sollbruchstellen wurden weiterverfolgt. Momentane Tests zeigen, dass der Bentonit-Quelldruck ausreicht um diese Ampullen frühzeitig zu zerstören und die RN bzw. deren Homologe freizusetzen. Die momentan gewählte zylindrische Geometrie mit definierter Kluft-Apertur und direkter Messung der fluidgeschwindigkeitsabhängigen Kolloidfreisetzung mittels LIBD erlaubt einen direkten Vergleich mit dem CFM Langzeit-In-situ-Experiment und Modellabschätzungen der Erosionsraten von SKB (Report TR-10-64).

#### 4. Geplante Weiterarbeiten

AP1 + 2: Die geplanten Arbeiten sind im KOLLORADO-e Antrag ausführlich dargelegt und das neue Laborprogramm wird momentan mit GRS abgestimmt. Schwerpunkt des nächsten ½ a wird vor allem in der Einbringung des Packersystems mit kompaktierten, radionuklidmarkierten Bentonitringen im Felslabor Grimsel sein

AP3: Der Abschlussbericht zu KOLLORADO-2 wird als KIT Scientific Report #7645 im Februar 2014 veröffentlicht und für KOLLORADO-e wird weiterhin auf Publikationen in wissenschaftlichen Zeitschriften mit peer-review Verfahren fokussiert (siehe Berichte & Veröffentlichungen).

#### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Peer-reviewed eingereicht bzw. in Bearbeitung:

Fischer, Kurganskaya, Schäfer, Lüttge (2014, accepted) Appl. Geochem., “Variability of crystal surface reactivity: what do we know?”

Huber, Heck, Truche, Bouby, Brendlé, Hoess, Schäfer (2014, submitted), “Radionuclide desorption kinetics on synthetic Zn/Ni-labelled montmorillonite nanoparticles”.

Schäfer, Lagos, Hauser, Heck, Huber, Geckeis, Degueldre, Kontar, Blechschmidt (2014, to be submitted) ES&T, „Pu, Np, Am transport under near-natural flow conditions at the Grimsel Test Site (Switzerland)”

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11213</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Qualifizierung der Rechenprogramme $d^3f$ und $r^3t$ , Kurztitel Quader		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Querschnittsthemen mit Bezug zur Endlagerung		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.03.2013 bis 29.02.2016	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2013 bis 31.12.2013	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 732.700,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Schneider	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Mit den Programmpaketen  $d^3f$  und  $r^3t$  stehen Werkzeuge zur Modellierung der dichteabhängigen Grundwasserströmung und des Radionuklidtransportes durch poröse Medien (Projekte GRUPRO bzw. TRAPRO) mit expliziter Berücksichtigung von Wärmetransport, Klüften und Kluftsystemen zur Verfügung (E-DuR). Mehrskalensätze ermöglichen ihre Anwendung auf dichte geklüftet-poröse Gesteine großer geologischer Formationen (A-DuR). Ziele eines aktuellen Projektes sind eine deutliche Beschleunigung und verbesserte Handhabung von  $d^3f$  und  $r^3t$ , ein verbesserter Umgang mit Ungewissheiten sowie die Integration zu einem einheitlichen Werkzeug (H-DuR).

Ziel dieses Projektes ist die Modellierung von Grundwasserströmung und Schadstofftransport für verschiedene reale geologische Situationen und damit die Erhöhung des Vertrauens in die Modellierung großräumiger, heterogener Modellgebiete. Zur Anwendung und Überprüfung der Neuentwicklungen aus dem Projekt E-DuR sollen Modelle mit expliziter Berücksichtigung von Klüften und des Wärmetransportes, Problemstellungen mit freier Oberfläche und Rechnungen mit  $r^3t$ , gekoppelt mit PhreeqC bearbeitet werden.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

- AP1: Strömung und Transport im Kluftgestein
- AP2: Wärmetransport
- AP3: Freie Grundwasseroberfläche
- AP4: Modellierung des reaktiven Stofftransportes mit  $r^3t$
- AP5: Dokumentation
- AP6: Modellerstellung und Fehlerbehebung

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP1: Die Zusammenarbeit mit der TF GWFTS wurde fortgesetzt. Die Bearbeitung von Task 8d erforderte eine weitgehende Überarbeitung des bisherigen Modells. Es wurde um die 18 neuen Sondierungsbohrungen ergänzt. Außerdem enthält es nun ein sogenanntes „Skin“ – eine schmale Zone reduzierter Permeabilität an Strecken- und Bohrlochwänden, das nach eigenen Recherchen in Stripa und Äspö beobachtet wurde.
- AP2: Für den Testfall Borden Site wurden 2d und 3d Wärmetransportmodelle gerechnet. Eine neue Randbedingung für die Temperatur wurde implementiert. Die Warmwasserquelle wurde sowohl als Punkt- oder als auch als Linienquelle betrachtet. Die Konvergenz der Rechnungen wurde für mehrere Verfeinerungsstufen der Rechengitter untersucht. Dabei traten zum Teil gitterabhängige Artefakte auf, deren Ursache noch gefunden werden muss.
- AP3: Auf Basis der im Rahmen des FLIN-Projektes durchgeführten quasi 2d Laborexperimente zur Entstehung und die Rückbildung einer Süßwasserlinse wurden weitere Vergleichsrechnungen – u. a. zu FEFLOW, OGS, GMS und Spring – durchgeführt. Zunächst wurden die Randbedingungen verändert. Später lag der Schwerpunkt auf einer Gitterverfeinerung. Inzwischen wurden durch LIAG und BGR die Ergebnisse weiterer Experimente veröffentlicht. Mit den Rechnungen dazu wurde begonnen.
- AP4-6: Wurden noch nicht bearbeitet.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Die Arbeiten werden entsprechend der im Antrag angegebenen Vorgehensweise fortgesetzt.

- AP1: Mit dem neuen Modell für Task 8d wird geprüft, ob sich die gemessenen Ausflussraten unter Berücksichtigung des Skins reproduzieren lassen.  
Es wird ein Bericht erstellt, der alle bisherigen Arbeiten zu Task 8 zusammenfasst.  
Teilnahme am nächsten Treffen der TF GWFTS in Korea.
- AP2: Das Borden-Modell wird weitergeführt und auf eine freie Grundwasseroberfläche erweitert.  
Die Cauchy-Randbedingung für die Temperatur wird getestet.  
Sobald die Daten zur Verfügung stehen, werden weitere Experimente der FLIN-Versuchsreihe nachgerechnet.
- AP3: Mit der Erstellung des Modelles für das Ems-Ästuar wird begonnen.
- AP4: Beginn der Arbeiten.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Technische Universität Clausthal, Adolph-Römer-Str. 2 a, 38678 Clausthal-Zellerfeld		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11223</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Langzeitsicheres Abdichtungselement aus Salzschnittblöcken – Vorprojekt zur Kalkulation und Qualifizierung der Forschungsarbeiten		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.08.2013 bis 31.07.2014	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.08.2013 bis 31.12.2013	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 149.057,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Düsterloh	

### 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Konstruktion und angebotsbasierende Kalkulation eines Technikumsprüfstandes zur Analyse des mechanischen und hydraulischen Verhaltens von Abdichtungselementen aus Salzschnittblöcken mit Fugenfüllung sowie Durchführung kleinmaßstäblicher Voruntersuchungen zur Herstellung zylindrischer Prüfkörper aus Salzschnittblöcken mit Fugenfüllung.

### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Konstruktion des Technikumsprüfstandes
- AP2: Angebotsbasierende Kalkulation des Technikumsprüfstandes
- AP3: Untersuchungen zur Profilierung von Salzschnittblöcken unter Berücksichtigung eines kreiszylindrischen Schachtquerschnittes, variierter Fugenbreiten und der Vermeidung axial durchschlägiger Fugen
- AP4: Herstellung kleinskaliger Verbundsysteme zur Erprobung der Schleif- und Sägetechniken
- AP5: Voruntersuchungen zur Herstellung von Fugenmaterial aus Salzpaste / Salzschmelze / SVV
- AP6: Berichtsfassung mit Stellungnahme zur technischen Machbarkeit mit Kostenkalkulation

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Erarbeitung eines Anforderungsprofils für den Technikumsprüfstand bezüglich Probengröße, maximaler axialer, radialer und volumetrischer Stauchungen und Dehnungen im Versuch sowie minimaler und maximaler mechanischer, hydraulischer und thermischer Beanspruchungen und Beanspruchungsraten unter Berücksichtigung relevanter In-situ-Bedingungen. Analyse alternativer Funktions- und Messprinzipien zur konstruktiven Realisierung des Anforderungsprofils unter besonderer Berücksichtigung der erforderlichen und vorhandenen Infrastruktur (Versuchshallengröße, Konfiguration Hebezeuge für Probenein- und Probenausbau, Ableitung statischer Belastungen, elektrische Anschlussleistung). Konstruktion und statische Bemessung (Druckzelle, Verschraubungen, lastübertragende Anlagenkomponenten) einer das Anforderungsprofil technisch und wirtschaftlich optimal erfüllenden rahmenlosen, dreiteiligen Triaxialprüfanlage sowie Massenberechnungen mit Bemessung von Bodenbelastung und Hebezeugen. Funktions- und leistungstechnische Auslegung von Axialdruck-, Radialdruck, Fluiddruck- und Gasdruckkreislauf zur mess- und regelungstechnischen Realisierung von Triaxialversuchen mit mechanisch-hydraulisch-thermisch gekoppelter Beanspruchung und Zweiphasenströmung (Gas + Flüssigkeit) für versuchstechnisch variable hydraulische Gradienten. Im Ergebnis der vorstehend skizzierten Arbeiten ist die grundsätzliche Konstruktion des Technikumsprüfstandes erfolgreich abgeschlossen, sodass sich die weiterführenden Arbeiten zu AP1 auf Fragestellungen zur maschinenbautechnischen Detailkonstruktion (Festlegung erforderlicher Passungen, Dichtungen, Maßhaltigkeiten, Sicherheitseinrichtungen, etc.) beschränken.

Vergleich alternativer Schleif- und Sägetechniken zur Herstellung von Salzschnittblöcken mit variabler Stereometrie. Auswahl, Beschaffung und Inbetriebnahme einer für die Herstellung von Salzschnittblöcken geeigneten Fräsmaschine.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Erarbeitung von Konstruktionszeichnungen (Detailkonstruktion) für diejenigen mechanischen Komponenten des Technikumsprüfstandes, die durch Dritte zu fertigenden sind und nachfolgende Einholung von Angeboten zur Kostenkalkulation. Kalkulation der Material- und Herstellungskosten für die in Eigenbau zu erstellen Anlagenkomponenten.

Einholung von Angeboten für die hydraulischen und die mess- und regelungstechnischen Komponenten des Technikumsprüfstandes.

Raumplanung für Anlagenkonfiguration, Hebezeuge und Versuchsbetrieb (infrastrukturelle Anforderungen an die Machbarkeit und Funktionalität des Technikumsprüfstandes in den vorhandenen Räumlichkeiten).

Theoretische Untersuchungen zur Stereometrie von Salzschnittblöcken unter der Zielsetzung einer Vermeidung axial durchschlägiger Fugen im Verbundsystem. Validierung der Stereometrie durch Herstellung kleinskaliger Verbundsysteme (→ Funktionsmodelle aus Inertmaterial) und Herstellung von Salzschnittblöcken.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<b>Auftragnehmer:</b> DBE Technology GmbH, Eschenstr. 55, 31224 Peine		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11233</b>	
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Status Quo der Lagerung C-14-haltiger Abfälle aus deutschen Hochtemperatur- und Forschungsreaktoren und Strategie (Lösungsansatz) zu deren künftigen Endlagerung (Carbon-ForeSt)			
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Endlagersystem			
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.07.2013 bis 31.12.2014		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2013 bis 31.12.2013	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 141.583,00 EUR		<b>Projektleiter:</b> Dörr	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Zielsetzung des Vorhabens ist es, den Graphit/Kohlestein aus den Hochtemperaturreaktoren und der Forschungsreaktoren, der in Deutschland zu entsorgen ist, Mengen- und Aktivitätsmäßig zu erfassen und unter Berücksichtigung der rechtlichen Rahmenbedingungen zur Zwischenlagerung, zum Transport und zur Endlagerung ein geeignetes Konditionierungs- und Verpackungskonzept zu erstellen. Für den Graphit/Kohlestein aus dem THTR 300 und den Forschungsreaktoren sowie den im Porenleichtbeton eingebundenen Kernbrennstoff und Graphitstaub aus dem AVR soll ein Entsorgungskonzept im Hinblick auf eine Einlagerung in das Endlager Konrad erstellt werden. Für den Graphit/Kohlestein des AVR soll aufgrund des hohen Aktivitätsinventars an C-14 dieser radioaktiven Abfälle die Entsorgung in einem zukünftigen Endlager für wärmeentwickelnde Abfälle erfolgen.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Aktuelle Bestandsaufnahme und Beschreibung des in Hochtemperatur und Forschungsreaktoren verwendeten Graphits/Kohlesteins
- AP2: Beschreibung der rechtlichen Regelungen/Rahmenbedingungen für die Zwischenlagerung, den Transport und der Endlagerung der graphit-/kohlesteinhaltigen Abfälle
- AP3: Abgleich der ermittelten Massen bzw. Aktivitäten des Graphits/Kohlesteins mit den rechtlichen Rahmenbedingungen im Hinblick auf eine mögliche Einlagerung im Endlager Konrad
- AP4: Entwicklung und Beschreibung von möglichen Konditionierungsverfahren und Behälterkonzepten
- AP5: Dokumentation

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

- AP1: Mit der aktuellen Bestandsaufnahme der Inventare (Massen, Aktivitäten) des in Deutschland zu entsorgenden Graphits/Kohlesteins wurde begonnen. Neben einer Literaturrecherche wurde eine Abfrage der Ablieferungspflichtigen gestartet. Mit der Auswertung der Antworten wurde begonnen.
- AP2: Die zusammenfassende Beschreibung der in Deutschland geltenden rechtlichen Regelungen und Rahmenbedingungen für die Zwischenlagerung, den Transport und die Endlagerung der graphit-/kohlesteinhaltigen Abfälle erfolgte anhand der identifizierten Anforderungen und Regelungen im AtG, in der StrlSchV, in der ADR/RID und aus dem Planfeststellungsbeschluss zum Endlager Konrad.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

- AP1: Die aktuelle Bestandsaufnahme der Inventare soll abgeschlossen werden. In diesem Rahmen sind Fachgespräche mit den Ablieferungspflichtigen geplant und zum Teil schon terminiert.
- AP2: Die zusammenfassende Beschreibung der in Deutschland geltenden rechtlichen Regelungen und Rahmenbedingungen für die Zwischenlagerung, den Transport und die Endlagerung der graphit-/kohlesteinhaltigen Abfälle soll abgeschlossen werden.
- AP3: Der in diesem Arbeitspaket geplante Abgleich der ermittelten Massen bzw. Aktivitäten des Graphits/Kohlesteins mit den im Arbeitspaket 2 beschriebenen rechtlichen Rahmenbedingungen im Hinblick auf eine mögliche Endlagerung im Endlager Konrad wird durchgeführt.
- AP4: Basierend auf den Ergebnissen des Arbeitspaketes 3 sollen mit der Beschreibung der möglichen Konditionierungsverfahren und die Behälterkonzepte für die Entsorgung des Graphits/Kohlesteins begonnen werden.

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

Keine.

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11243</b>	
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Langzeitsicherer Schachtverschluss im Salinar – Ergänzende laborative und modelltheoretische Untersuchungen zum HM-gekoppelten Rekompaktionsverhalten der EDZ (LASA-EDZ)			
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Querschnittsthemen mit Bezug zur Endlagerung			
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.09.2013 bis 31.12.2016		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.09.2013 bis 31.12.2013	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 952.430,00 EUR		<b>Projektleiter:</b> Dr. Czaikowski	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

- Laboruntersuchungen zum Langzeitverhalten der EDZ für verschiedene Belastungsszenarien (z. B. trockene Rekompaktion sowie Rekompaktion bei flüssigkeitsgefülltem Porenraum).
- Prozessanalytische Modellrechnungen zur Validierung der THM gekoppelten Stoffmodelle und zur Verbesserung des Verständnisses der gekoppelten hydraulisch-mechanischen Prozesse im Bereich der Auflockerungszone.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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



### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im 1. Hj. 2013 ist es gelungen Bohrkernmaterial aus der Auflockerungszone eines Untertage Bauwerks zu beschaffen, das unter In-situ-Bedingungen errichtet und dem Gebirgsbeanspruchungszustand ausgesetzt wurde. Nachdem im geotechnischen Labor der GRS die Prüfkörperpräparation durchgeführt wurde, ist zunächst der Grad der Beanspruchung/Schädigung experimentell einzugrenzen, dem die Proben in situ durch die Spannungsumlagerungen des Gebirges im Zusammenhang mit dem Bau des Damms ausgesetzt worden sind. Als Indikator für den Grad der Gesteinsschädigung wird die Gasdurchlässigkeit angesetzt.

Hierzu wurde im Autoklaven an 2 Gesteinsproben aus der Auflockerungszone die Beziehung zwischen der Gasdurchlässigkeit und Minimalspannung während der Rekompaktion der Proben ermittelt. Der Versuchsablauf wurde in 2 Phasen unterteilt:

(a) In der ersten Phase wurden die Proben unter stufenweise erhöhter Minimalspannung (10/20/30/40/50 bar) rekompaktiert und dabei jeweils die Gaspermeabilität gemessen. Nach Abschluss der Messungen zur Gasdurchlässigkeit in der 5. Laststufe wurde die Beanspruchung von 50 bar konstant gehalten.

(b) In der zweiten Phase wurde bei einer unveränderten Minimalspannung von 50 bar im wöchentlichen Abstand die Gasdurchlässigkeit bestimmt. Hierzu wurde der Differenzdruck für alle Folgemessungen gleich gewählt.

Bei der ersten Probe konnte in der Versuchsphase (a) eine mit der Beanspruchung deutlich abnehmende Gasdurchlässigkeit von  $3 \cdot 10^{-18} \text{ m}^2$  auf  $8 \cdot 10^{-19} \text{ m}^2$  ermittelt werden. Dieser Wert nahm im Laufe der Phase (b) bis zum Ende des Jahres auf einen Wert von  $2\text{-}3 \cdot 10^{-19} \text{ m}^2$  ab.

Bei der zweiten Probe wurde bereits in der ersten Laststufe eine Gasdurchlässigkeit von  $5 \cdot 10^{-19} \text{ m}^2$  ermittelt. Dieser Wert verringerte sich bereits in der zweiten Laststufe auf  $4 \cdot 10^{-20} \text{ m}^2$ . In der dritten Laststufe mit 30 bar Minimalspannung konnte mit dem Gasdruck von 7 bar kein Gasfluss durch die Probe beobachtet werden.

Ob die Differenzen der ermittelten Gasdurchlässigkeiten auf die unterschiedliche Entnahmetiefe der Prüfkörper in der Bohrung zurückgeführt werden kann, ist noch mit weiteren experimentellen und modelltheoretischen Untersuchungen zu belegen.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Fortführung experimenteller Untersuchungen
- Durchführung erster orientierender modelltheoretischer Untersuchungen, Vergleich mit Literaturdaten
- Dokumentation

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Technische Universität Clausthal, Adolph-Römer-Str. 2 a, 38678 Clausthal-Zellerfeld		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11253</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Strömungstechnischer Funktionsnachweis für Verschlussbauwerke im Steinsalz und deren flüssigkeitsgestützte Abdichtung – Phase I (Konzeption von Funktionsnachweis und Abdichtungsmethoden, Testung und Auswahl von Behandlungsfluiden)		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2013 bis 31.12.2015	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.10.2013 bis 31.12.2013	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 296.744,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Langefeld	

### 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Die Untersuchungen sollen für Verschlusskonzepte im Bereich der Endlagerung für radioaktive, wärmeentwickelnde Abfälle (HAW) im Steinsalz durchgeführt werden, um die Methodik des Integritätsnachweises zu bereits vorliegenden Konzepten von Verschlussbauwerken durch geeignete in-situ Testverfahren zu ergänzen. Dabei sollen die Testverfahren als Bausteine im Rahmen eines Integritätsnachweises einzelner Bauwerke zu verstehen sein, der Teil eines gesamten Langzeitsicherheitsnachweises ist.

Die Ergebnisse der Forschungsarbeiten sollen allgemeingültig auf jedwedes Endlager für HAW im Steinsalz nutzbar sein. Dabei wird auch darauf Augenmerk gelegt, dass die Endlagersicherheitsforschung derzeit einer der Themenbereiche ist, welche seitens des Bundesministeriums für Wirtschaft und Technologie gefördert wird.

Innerhalb des Abschnittes „Geotechnische Barrieren“ ordnet sich das geplante Vorhaben in folgende Schwerpunkte des Förderkonzeptes ein:

- Konzeption, Bau und Erprobung langzeitsicherer Abschlussbauwerke bzw. deren Komponenten für Endlager im Steinsalz
- Entwicklung von Konzepten für Verschlussysteme im Bereich der Kontakt- und Auflockerungszone mit Nachweis der Barrierewirkung
- Strömungstechnischer Funktionsnachweis für Verschlussbauwerke und flüssigkeitsgestützte Abdichtung des Kontaktbereichs
- Ingenieurtechnischer Nachweis der Langzeit-Barrierewirkung der geotechnischen Barrieren “

Weiter berühren die durchzuführenden Arbeiten den Themenbereich Systemverhalten und Systembeschreibung (6.2.) Abschnitt Wirtsgestein:

- Untersuchung und Modellierung des geomechanischen, geochemischen und thermohydromechanischen von Steinsalz und Tonsteinen

### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Übersicht Verschlusskonzepte
- AP2: Formulierung der Anforderungen
- AP3: Katalog der Vergütungsmedien
- AP4: Strömungstechnische, chemische und rheologische Charakterisierung
- AP5: Berichtslegung

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

Während des Berichtszeitraumes wurde eine Übersicht über hydraulisch abbindende Streckenverschlussbaustoffe und Streckenverschlusskonzepte erstellt. Diese wurden dann möglichst genau charakterisiert, um die Schwachstellen der einzelnen Systeme sowie besonders die möglichen Strömungsräume ausfindig zu machen. Besonderes Augenmerk wurde hierbei auf folgende Strömungsbereiche gelegt.

- Im Dichtstoff
- Im Kontaktbereich Dichtstoff/Gebirge
- In der Auflockerungszone

Am 27. November fand das letzte Projektpartnertreffen statt, mit dem Ziel die im nächsten Arbeitspaket (Formulierung der Anforderungen für Vergütungsmedien) zu erledigenden Arbeiten zu koordinieren.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Im nächsten Berichtszeitraum sollen die oben ausfindig gemachten Strömungsbereiche so detailliert wie möglich charakterisiert werden in Bezug auf:

- Lage von Wegsamkeiten
- Form von Wegsamkeiten
- Zu erwartende Permeabilitäten
- Eventuell zu erwartende spezielle chemische Eigenschaften im Bereich der Wegsamkeit

Sobald diese Eigenschaften der Wegsamkeiten bekannt sind können daraus die Anforderungen für die Vergütungsmedien im jeweiligen Strömungsbereich formuliert werden.

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

Keine.

<b>Auftragnehmer:</b> DBE Technology GmbH, Eschenstr. 55, 31224 Peine		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11263</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Sicherheitstechnische Untersuchungen zum Schachttransport schwerer Lasten bis zu 175 Tonnen Nutzlast (SULa)		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Endlagersystem		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2013 bis 31.03.2015	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.10.2013 bis 31.12.2013	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 228.114,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Filbert	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Zielsetzung des Vorhabens ist es, die Grundlage zum Nachweis der technischen Realisierbarkeit einer Schachtförderanlage mit 175 t Nutzlast (Endlagerung von Transport- und Lagerbehältern, TLB) einschließlich der wesentlichen maschinen- und bergtechnischen Komponenten und Anlagenteile zu schaffen sowie die Grundlagen zu legen zum Nachweis der Sicherheit des Transportbetriebes insbesondere unter dem Aspekt des Strahlenschutzes. Die Genehmigungsfähigkeit der Endlagerung von radioaktiven Abfällen und ausgedienten Brennelementen in TLB (z. B. vom Typ CASTOR®) bedingt den Nachweis, dass alle Komponenten des Schachttransportes für Nutzlasten von bis zu 175 t und die entsprechenden Überlasten dem Stand der Technik entsprechen. In dem vorliegenden Vorhaben soll die wirtsgesteinsunabhängige Einsetzbarkeit der zu entwickelnden Schachtfördertechnik bis zu einer max. Teufe von 1 000 m nachvollziehbar dargestellt werden. Weiterhin werden die zu erwartenden Auswirkungen der Einlagerung von TLB in Ton- bzw. Granitformationen, z. B. hinsichtlich erforderlicher Zwischenlagerzeiten, bewertend beschrieben. Im Rahmen dieses Vorhabens soll der Stand der Technik bei der Durchführung von Störfallanalysen (deterministisch / probabilistisch) unter besonderer Berücksichtigung der Restrisikominimierung ermittelt werden. Dazu sollen die Fortentwicklung der Probabilistischen Sicherheitsanalyse seit 1994, die Übertragbarkeit der Methoden zur PSA für Kernkraftwerke auf die Schachtförderanlage, ein deterministischer Ansatz, internationale Entwicklungen und Maßnahmen zur Restrisikominimierung untersucht werden.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- Ap1: Differenzbetrachtung probabilistische Sicherheitsanalysen (PSA): 1994 vs 2013
- AP2: Übertragbarkeit der Methoden zur PSA für Kernkraftwerke auf Schachtförderanlagen
- AP3: Bewertung eines deterministischen Ansatzes zur Störfallanalyse
- AP4: Internationale Entwicklungen bei Sicherheitsanalysen zur Schachttransporttechnik
- AP5: Maßnahmen zur Restrisikominimierung
- AP6: Berichtswesen

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

Im Berichtszeitraum wurde im Rahmen des Arbeitspaketes 1 im Entwurf eine Differenzbetrachtung gefertigt, die die Vorgehensweise für eine „Probabilistische Sicherheitsanalyse“ (PSA) aus dem Jahr 1994 zur Schachtförderanlage für 85 t Nutzlast derjenigen einer PSA für Kernkraftwerke aus dem Jahr 2013 gegenüberstellt und bewertet.

In einem ersten Schritt wurden die PSA Methoden, der Stand der Technik und die Fortentwicklung der PSA bis zum Jahr 2013 in Deutschland dargestellt. Der Schwerpunkt wurde auf die Beschreibung der verwendeten Methoden im Rahmen der Sicherheitsanalysen der Kernkraftwerke in Deutschland sowie auf die Stufe 1 (Ereignisabläufe, die zur Gefährdung der Brennelementkühlung führen können, werden ermittelt und quantifiziert) und Stufe 2 (Ausgehend von den Kernschadenzuständen, werden die möglichen weiteren Ereignisabläufe mit Kernschmelzen bis zur Freisetzung radioaktiver Stoffe in die Anlagenumgebung analysiert.) der PSA gelegt. In Deutschland ist die PSA bis einschließlich der Stufe 2 methodisch nach Stand von Wissenschaft und Technik und unter Verwendung von anlagenbezogenen Datenerhebungen durchzuführen. Es besteht Einvernehmen zwischen den atomrechtlichen Aufsichtsbehörden und den Betreibern der Kernkraftwerke in Deutschland, dass im Zusammenhang mit der Stufe 1 der PSA auch die Stufe 2 der PSA durchgeführt wird.

Im Rahmen der PSA 1994 wurden Fehlerbäume zur Quantifizierung der Systemzuverlässigkeit und auch um die Eintrittshäufigkeiten der „Erhöhung der Strahlenbelastung des Betriebspersonals“ und der „Freisetzung von radioaktivem Material“ zu ermitteln, verwendet. Ereignisbäume der Stufe 2 wurden nicht verwendet und daher auch Gefährdungszustände nicht dargestellt.

Eine Betrachtung der Auswirkungen von Ereignissen und die vergleichbare Einstufung von Eintrittshäufigkeiten wurden bei der PSA 1994 nicht durchgeführt. Ein weiterer Detaillierungsschritt ist notwendig, um die Gefährdungszustände festzulegen. Danach wäre es auch möglich, die PSA Stufe 2 mit der Hilfe von Ereignisbäumen durchzuführen. Hierbei sollten verschiedene Endzustände in ihren Auswirkungen ermittelt werden, z. B. die Höhe der Strahlenbelastung des Betriebspersonals oder die Menge des radioaktiven Materials, das in die Umgebung freigesetzt würde.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Die Arbeiten werden entsprechend der im Antrag angegebenen Vorgehensweise fortgesetzt.

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

Keine.

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln	<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11273</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Vorprojekt (UMB-V)	
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung	
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.12.2013 bis 30.11.2014	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.12.2013 bis 31.12.2013
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 93.918,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Meleshyn

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Die Ziele des Verbundvorhabens bestehen in der Entwicklung abgesicherter, objektiver Kriterien zur Auswahl geeigneter Bentonite für den Einsatz in Endlagern für wärmeentwickelnde Abfälle. Hauptziel des Vorprojektes ist es zu zeigen, dass neue Vorgehensweisen zur Untersuchung der Wechselwirkungen von Bentoniten mit Lösungen bei erhöhten Temperaturen durchführbar sind und zu messbaren Ergebnissen führen. Konkret soll festgestellt werden, ob Änderungen des Quellvermögens von Bentoniten infolge der Reaktion mit Lösungen bei verschiedenen Temperaturen quantifizierbar sind und ob diese zu messbaren Änderungen der Permeabilität hochkompakter Bentonite führen.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Dieser Nachweis soll im Vorprojekt anhand der Untersuchung eines reaktiven Bentonits erfolgen, der mit einer NaCl-Lösung bei 60 ° und 90 °C sieben Monate reagiert hat, erbracht werden. Das durch die Reaktion veränderte Quellvermögen und die dadurch möglicherweise veränderte Permeabilität des Bentonits soll erfasst werden. Eine Ausweitung dieser Untersuchungen auf ein weiteres Formationswasser und weitere Bentonite sowie die detaillierte Analyse der Ursachen der gemessenen mechanisch-hydraulischen Parameter soll erst im Hauptprojekt mittels mineralogisch-chemischer Untersuchungen der Reaktionsprodukte und mittels quantenmechanischer Modellrechnungen erfolgen. Im Hauptprojekt sollen zudem die Versuche über einen längeren Zeitraum erfolgen.

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

Mit den zukünftigen Kooperationspartnern im UMB-Hauptprojekt, Dr. J. Kasbohm von GeoENcon und Herren Kaufhold von der BGR, wurden vorhandene Bentonite der BGS gescreent und ein bayerischer Bentonit B11 mit den Kennzeichen  $Ca \gg Na$  bei  $okt. Al > 1.45$  und  $okt. Fe > 0.2$  für die Untersuchungen im Vorprojekt ausgesucht. 5 kg dieses Bentonits werden von der BGR der GRS im Januar 2014 zur Verfügung gestellt.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

- Dialyse des Bentonits
- Beschaffung der Zellen für die Quelldruck- und Permeabilitätsmessungen
- Beschaffung der Glasgefäße in denen die Reaktionen bei  $60^\circ$  und  $90^\circ C$  durchgeführt werden sollen
- Durchführung der Quelldruck- und Permeabilitätsmessungen am dialysierten Ausgangsmaterial
- Beginn der Reaktionsexperimente bei den genannten Temperaturen

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

Nguyen Thanh Lan, Jörn Kasbohm, Horst-Jürgen Herbert, Hoang Thi Minh Thao (2014): Rate of Alteration"-Experiments on a Series of Bentonite – Poster auf der International Conference of Engineered Barriers, Feb., 02.07.2014, BGR, Hannover.

Im o. g. Poster wird die Untersuchungsmethodik die dem UMB-Vorhaben zugrunde liegt vorgestellt.





## **2.2 W-Vorhaben**

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Forschungszentrum Jülich GmbH, Wilhelm-Johnen-Straße, 52428 Jülich	<b>Förderkennzeichen:</b>  <b>02 W 6263</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Neu- und Weiterentwicklung von Safeguardstechniken und -methoden	
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Kernmaterialüberwachung	
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2013 bis 30.09.2017	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.10.2013 bis 31.12.2013
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 772.232,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Niemeyer

### 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Die Aufgabe des Vorhabens bestand darin, die Bundesregierung (vertreten durch das Bundesministerium für Wirtschaft und Technologie, BMWi) in Fragen der internationalen Kernmaterialüberwachung zu beraten und bei der Weiterentwicklung der Kontrollen zu unterstützen. Im Einzelnen zielte das Vorhaben ab auf Lösungsvorschläge zur weiteren Implementierung des Zusatzprotokolls, Einführung der sog. integrierten Sicherungsmaßnahmen (Integrated Safeguards), Weiterentwicklung des sog. Staatskontrollansatzes (State-level Approach), Entwicklung von anlagen- und brennstoffkreislaufspezifischen Kontrollmethoden sowie Weiterentwicklung von Safeguardstechniken und -methoden unter dem Aspekt der Proliferationsresistenz. Die Arbeiten dienten der Bereitstellung von Arbeitspapieren, Techniken und Veröffentlichungen und der Entwicklung von Auswertemethoden mit dem Ziel der Übernahme der Ergebnisse durch BMWi, Euratom-Kontrollbehörde und Internationale Atomenergie-Organisation (IAEO).

### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Programmpunkte und Arbeitspakete sind

- Weiterentwicklung von Safeguardstechnologien (Digitale Überwachungssysteme und Datenfernübertragung, analytische Messmethoden, Satellitenfernerkundung und Geoinformationstechnologien)
- Neuentwicklung von Safeguardstechnologien (Technologische Zukunftsforschung, Simultane Lokalisierung und Kartenerstellung, geophysikalische Messverfahren, Lasertechniken)
- Safeguards-by-Design
- Safeguards für Nuklearanlagen (Entsorgung abgebrannter Brennelemente, Zentrifugenanreicherungsanlagen)
- Weiterentwicklung des staatspezifischen Kontrollansatzes
- Kooperation mit der DGAP zur technisch-politischen Schnittstelle der internationalen Safeguards
- Pflege des nationalen Safeguards-Internet-Portals
- Entwicklung eines Qualitätsmanagements für das EURATOM-Safeguardssystem
- Weiterentwicklung von Safeguards-Überlegungen im Rahmen von „3S“ (Sicherheit, Sicherung, Safeguards)
- Mitarbeit in der European Safeguards R&D Association (ESARDA)
- Weitere Aktivitäten (INMM, SAGSI)

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- Geologische Endlagerung: Projektleitung bei 3-D-Modellierung seismischer Ausbreitung für verschiedene Quellen; Projektleitung bei Arbeiten zur gerichteten Radartechnologie; Mitarbeit in der Safeguards-Expertengruppe ASTOR der IAEO.
- Datenfernübertragung: Mitarbeit bei der Vereinbarung für die Implementierung der DFÜ von Safeguards-Daten aus den Standort-Zwischenlagern.
- ESARDA: Mitarbeit im Steering und Editorial Committee; Leitung der AG „Verification Technologies and Methodologies“; Mitarbeit in den AGn „Containment and Surveillance“, „Destructive Analysis“, „Training and Knowledge Management“ sowie „Implementation of Safeguards“.
- Safeguardstechniken: Projektleitung bei der Implementierung von NGSS, DMCA, HM-5 Software.
- Safeguardsanalytik: Durchführung eines gemeinsamen Promotionsprojektes mit dem Safeguardslabor der IAEO zur Produktion und Charakterisierung von Referenzpartikeln; Qualifizierung Jülichs für das Netzwerk der IAEO-Analyselaboratorien (NWAL); Projektleitung bei der LIBS Machbarkeitsstudie.

- Satellitenfernerkundung und Geoinformationstechniken: Projektleitung zweier Studien zum Einsatz von Fernerkundung und Geoprocessing in der IAEO.
- Novel Technologies: Durchführung eines Feldtestes zur Verwendung der simultanen Lokalisierung und Kartenerstellung (Simultaneous Localization and Mapping, SLAM).
- Safeguards-Konzepte: Weiterentwicklung von „State-level Concept“ (SLC), „Acquisition Path Analysis“ (APA) und „Safeguards-by-Design“ (SBD).
- AKÜ/WKK und VGB-Arbeitskreis: Mitarbeit und Teilnahme an den Sitzungen.
- Standing Advisory Group on Safeguards Implementation (SAGSI): SAGSI-Mitarbeit.
- Zusatzprotokoll und Implementierung von Integrated Safeguards (IS): Unterstützung und Beratung von Betreibern; Unterstützung des BMWi bei Anfragen von IAEO und Euratom; Erstellung der Deklaration für Deutschland nach dem Zusatzprotokoll; Erstellung von Vorlagen zur Einführung von Integrated Safeguards für spezielle Anlagen; Teilnahme an Besprechungen; Kommentierung von Entwürfen/Vorlagen Dritter.
- IAEO-Inspektionsberichte: Erfassung, Aufbereitung und Auswertung; Auskünfte zu Anfragen des BMWi.
- Inspektionsplanung und -bewertung: Leitung eines Projekts zur Verbesserung der Kernmaterialüberwachung der IAEA unter Einbezug neuer analytischer Methoden aus Statistik, Operations Research und Spieltheorie.
- Nichtverbreitung von Massenvernichtungswaffen und sensitiven Technologien: Expertensitzung bei der DGAP zu den Themen Nichtverbreitung und Abrüstung als präventive Sicherheitspolitik, Chemiewaffen in Syrien, nukleare Entsorgung in Deutschland (21.11.13).

#### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Safeguards-Web-Portal: Realisierung des Konzeptvorschlags.
- Geologische Endlagerung: Fortsetzung der Geomodellierung von möglichen Signalen und deren Ausbreitung; Fortsetzung der Arbeiten zur gerichteten Radartechnologie; vergleichende Analyse der seismischen Messungen an den Standorten Gorleben und Olkiluoto.
- Datenfernübertragung: Unterstützung bei der Implementierung der DFÜ von Safeguards-Daten aus den Standort-Zwischenlagern.
- Fortführung laufender Arbeiten in den ESARDA-Arbeitsgruppen und -Gremien.
- Safeguardstechniken: Weitere Implementierung von NGSS, DMCA, HM-5 Software.
- Novel Technologies: Fortsetzung Machbarkeitsstudie von SLAM.
- Safeguardsanalytik: Fortsetzung des gemeinsamen Promotionsprojektes zur Produktion und Charakterisierung von Referenzpartikeln; Fortsetzung der Qualifizierung Jülichs für IAEO-NWAL; Erweiterung der LIBS Machbarkeitsstudie um Laserinduzierte Fluoreszenz (LIF).
- Satellitenfernerkundung: Weiterführung der Studien zum Einsatz von Fernerkundung und Geoprocessing.
- Safeguards-Konzepte: Weiterentwicklung von SLC, APA und SBD.
- Mitarbeit in den nationalen Gremien AKÜ/WKK und VGB-Arbeitskreis.
- SAGSI: SAGSI-Mitarbeit.
- Unterstützung des BMWi bei Umsetzung des Zusatzprotokolls und Einführung und Bewertung von IS.
- IAEO-Inspektionsberichte: Erfassung, Aufbereitung und Auswertung; Beratung des BMWi.
- Inspektionsplanung und -bewertung: Wissenschaftliche Beiträge, Teilnahme an Sitzungen bei der IAEO.
- Nichtverbreitung von Massenvernichtungswaffen und sensitiven Technologien: DGAP-Expertensitzungen.

#### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Niemeyer, B. Richter, M. Dürr, D. Bosbach, W. Trautwein; Joint Programme on the Technical Development and Further Improvement of IAEA Safeguards between the Government of the Federal Republic of Germany and the International Atomic Energy Agency; JOPAG/11.13-PRG-403; 2013

J. Altmann, H. Kühnicke; Acoustic and Seismic Measurements for the Detection of Undeclared Activities at Geological Repositories. Results from the Gorleben Exploratory Mine; JOPAG/11.13-PRG-404; 2013

W. Filbert; German Disposal Concepts for High-Level Waste and Spent Fuel in Rock Salt Formations; JOPAG/12.13-PRG-404; 2013



### **2.3 BMWi-Hausvorhaben**

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Projektträger Karlsruhe im Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Wassertechnologie und Entsorgung (PTKA-WTE), Hermann-von-Helmholtz-Platz 1, 76344 Eggenstein-Leopoldshafen		<b>Förderkennzeichen:</b>  <b>KWA 9005</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Unterstützungsprogramm Alternative Wirtsgesteine		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Endlagersystem		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.01.2011 bis 31.12.2013	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2013 bis 31.12.2013	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 1.101.993,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Pitterich	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Entsorgungskonzept der Bundesregierung sieht die Endlagerung radioaktiver Abfälle in tiefen geologischen Formationen vor. Von 2011 bis 2014 werden FuE-Arbeiten zu noch offenen Fragestellungen der Endlagerung im Steinsalz durchgeführt. Parallel dazu soll der wissenschaftlich-technische Kenntnisstand zur Endlagerung Wärme entwickelnder Abfälle in Tonsteinen auf einen möglichst hohen Stand gebracht werden. Fragestellungen zur Endlagerung in kristallinen Gesteinen werden ergänzend bearbeitet, der Schwerpunkt liegt auf FuE-Arbeiten zum Technischen Barriersystem (Engineered Barrier Systems).

Der überwiegende Teil dieser Untersuchungen wird im Rahmen internationaler Projekte in Untertagelabors in Schweden, der Schweiz und Frankreich durchgeführt. Ferner soll die Erweiterung des Kenntnisstands zu Endlagersystemen in alternativen Wirtsgesteinen durch die Unterstützung von Kooperationen auf der Basis bzw. in Anlehnung an bestehende WTZ-Abkommen, wie z. B. mit Russland, erfolgen.

Das Vorhaben hat zum Ziel Arbeiten deutscher Wissenschaftler, die im Rahmen internationaler Forschungsprogramme (z. B. Schweden, Schweiz, Frankreich) arbeiten, zu koordinieren und zu intensivieren.

Die von BMWi geförderten Vorhaben werden ausführlicher in den formalisierten Zwischenberichten in Kapitel 2.1 beschrieben. Die BGR und das KIT/INE beteiligen sich an Projekten in den URLs überwiegend auf der Basis ihrer jeweiligen Haushalts- bzw. Institutsmittel.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

### **FuE-Arbeiten zu Hartgesteinen/Granit im Felslabor Grimsel und im HRL Äspö**

(Vorhaben 02E9944, 02E11203A, 02E11203B; GRS/ KIT-INE)

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

(Vorhaben 02E10086, 02E10377, DBE, GRS)

Schwerpunkte der Arbeiten, die sowohl In-situ-, Labor-Untersuchungen und Modellierungsarbeiten umfassen, betreffen Untersuchungen zur Migration, zum Transport und zur Rückhaltung kolloidaler und gelöster Radionuklidspezies in den technischen und natürlichen Barrieren, Untersuchungen an technischen Verschlussmaterialien (EBS) sowie Entwicklung und Test numerischer Modelle zur Beschreibung von THM(C)-Prozessen.

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Die Vorhaben sind eingebunden in internationale Projekte und wurden bzw. werden zum Teil von der Europäischen Kommission im Rahmen des FP7 kofinanziert. Innerhalb der Vorhaben wurden Arbeiten mit Bezug zu folgenden Projekten ausgeführt:

#### *Hartgestein/Granit*

Felslabor Grimsel (CFM); HRL Äspö (Projekte: Prototype Repository, EBS Task Force, Temperature Buffer Test, Microbe, LASGIT, Alternative Buffer Materials)

- Weiterentwicklung und Anwendung von Methoden zur Messung des Aufsättigungsverhaltens des technischen Barriersystems, Ermittlung der physikalischen und chemischen Parameter sowie Einsatz in gekoppelten numerischen Modellen
- Numerische Modellierung und Laboruntersuchungen zum THM-Verhalten von Buffermaterialien
- In-situ- und Labor-Untersuchungen zum Transport und zur Ausbreitung von Aktiniden im Gebirge unter dem Einfluss von Kolloiden und Mikroben

#### *Tonstein*

Bure (Teilnahme am Versuchsprogramm der ANDRA), Mont Terri (SB-Experiment)

- Ermittlung relevanter, zur Beschreibung des Materialverhaltens erforderlicher Gesteinsparameter
- Entwicklung von Modellen zur Simulation von gekoppelten THM-Prozessen
- Weiterentwicklung der Methoden zur Messung der thermischen und hydraulischen Effekte auf das Wirtsgestein

Die Ergebnisse sind in den jeweiligen Vorhaben dokumentiert.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Die in den Vorhaben vorgesehenen Untersuchungen sind aus den Berichten in Kapitel 2.1 zu ersehen.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen




Siehe Berichte zu den einzelnen Vorhaben in Kapitel 2.1.






### 3 Verzeichnis der ausführenden Forschungsstellen



<b>Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR), Stilleweg 2, 30655 Hannover</b>		
02 E 10910	Virtuelles Untertagelabor im Steinsalz - VIRTUS	66
02 E 11061C	Methodenentwicklung und Anwendung eines Sicherheitsnachweiskonzeptes für einen generischen HAW-Endlagerstandort im Tonstein (AnSichT)	96
<b>DBE TECHNOLOGY GmbH, Eschenstraße 55, 31224 Peine</b>		
02 E 10086	Untersuchungen zur Auswirkung einer Temperaturerhöhung in Tonformationen in Deutschland im Hinblick auf die bautechnische Machbarkeit eines Endlagers und irreversible Veränderungen der potenziellen Wirtsformation -TemTon-	16
02 E 10639	Untersuchung zu Rahmenbedingungen und Aufbau eines Endlager-Monitoring für hochradioaktive Abfälle in verschiedenen Wirtsformationen und Phasen einer Endlagerentwicklung unter Berücksichtigung von Machbarkeit und Unsicherheiten (MonA)	24
02 E 10729	Komplettierung des Instrumentariums zur Technischen Realisierbarkeit und sicherheitlichen Bewertung von HAW-Endlagern im Salinar (KOMTESSA)	30
02 E 10730	Restporosität und -permeabilität von kompaktierendem Salzgrus-Versatz in einem HAW-Endlager	32
02 E 10760	Verbundprojekt: Untersuchungen zur Robustheit der Sicherheitsaussage zu HAW-Endlagersystemen in magmatischen Wirtsgestein - Kurztitel: URSEL	38
02 E 10900	Virtuelles Untertagelabor im Steinsalz - VIRTUS	64
02 E 11061B	Methodik und Anwendungsbezug eines Sicherheitsnachweiskonzeptes für ein HAW-Endlager im Tonstein	94
02 E 11082	Vergütung der Auflockerungszone im Salinar (VerA) Phase II - Generierung von Rissystemen einer Auflockerungszone im Korngrößenmaßstab und Überführung der Ergebnisse auf die Makroebene zur Simulation eines Injektionsvorganges	108
02 E 11112	Auswirkungen der Sicherheitsanforderungen Rückholbarkeit auf existierende Einlagerungskonzepte und Anforderungen an neue Konzepte (ASTERIX)	114
02 E 11152	Prozess-Simulation zur Konzeption von Stütz- und Dichtelementen für Schachtverschlüsse (ProSiD)	122
02 E 11162	Beteiligung an der Studie von KIT und Uni Stuttgart zur Partitionierung und Transmutation (P&T) hochradioaktiver Abfälle	124
02 E 11182B	Sicherheitsanalytische Untersuchungen für ein Endlager für radioaktive Abfälle in einer diagenetisch überprägten Tonformation in der Nachbetriebsphase – SanToS	130

- 02 E 11193B** Schachtverschlüsse für Endlager für hochradioaktive Abfälle (ELSA – Phase II): Konzeptentwicklung für Schachtverschlüsse und Test von Funktionselementen von Schachtverschlüssen  134
- 02 E 11233** Status Quo der Lagerung C-14-haltiger Abfälle aus deutschen Hochtemperatur- und Forschungsreaktoren und Strategie (Lösungsansatz) zuderen künftigen Endlagerung (CarbonForeSt)  144
- 02 E 11263** Sicherheitstechnische Untersuchungen zum Schachttransport schwerer Lasten bis zu 175 Tonnen Nutzlast (SULa)  150


**Dr. Andreas Hampel, Grünberger Str. 56, 55129 Mainz**

- 02 E 10810** Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von Modellberechnungen zum thermo-mechanischen Verhalten und zur Verheilung von Steinsalz (TV1: Dr. Andreas Hampel)  48










**Forschungszentrum Jülich GmbH, Wilhelm-Johnen-Straße, 52428 Jülich**

- 02 E 10780** Verbundprojekt: Verhalten langlebiger Spalt- und Aktivierungsprodukte im Nahfeld eines Endlagers und Möglichkeiten ihrer Rückholung (VESPA)  42
- 02 W 6263** Neu- und Weiterentwicklung von Safeguardstechniken und -methoden  156

**Friedrich-Schiller-Universität Jena, Fürstengraben 1, 07743 Jena**


- 02 E 11062B** Verbundprojekt: Modellierung von Datenungewissheiten auf hybriden Rechnern mit  $d^3f$  und  $r^3t$  (H-DUR)  100

**Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mit beschränkter Haftung, Schwertnergasse 1, 50667 Köln**


- 02 E 9944** Geoelektrische Untersuchung der Aufsättigung von Bentonitbarrieren im HRL-Äspö-Projekt „Prototype Repository“ – Phase 2  14
- 02 E 10367** Anpassung des EMOS-Programmsystems an moderne Softwareanforderungen  18
- 02 E 10377** Untersuchung der THM-Prozesse im Nahfeld von Endlagern in Tonformationen  20
- 02 E 10608** Werkzeuge und Daten für die Geochemische Modellierung, Kurztitel: WeDa  22
- 02 E 10689** Long-Term Performance of Engineered Barrier Systems, Kurztitel: PEBS  26
- 02 E 10719** Komplettierung des Instrumentariums zur Technischen Realisierbarkeit und Sicherheitlichen Bewertung von HAW-Endlagern im Salinar (KOMTESSA)  28
- 02 E 10740** Restporosität und -permeabilität von kompaktierendem Salzgrus-Versatz in einem HAW-Endlager  34
- 02 E 10750** Verbundprojekt: Untersuchungen zur Robustheit der Sicherheitsausage zu HAW-Endlagersystemen in magmatischen Wirtsgestein - Kurztitel: URSEL  36
- 02 E 10770** Verbundprojekt: Verhalten langlebiger Spalt- und Aktivierungsprodukte im Nahfeld eines Endlagers und Möglichkeiten ihrer Rückholung (VESPA)  40

02 E 10890	Virtuelles Untertagelabor im Steinsalz - VIRTUS	62
02 E 10941	Erprobung und Weiterentwicklung moderner Methoden der Sensitivitätsanalyse im Hinblick auf den Sicherheitsnachweis für ein künftiges Endlager - MOSEL	68
02 E 10951	Diffusion in kompaktiertem Salzgrus – DIKOSA	70
02 E 11061A	Methodik und Anwendungsbezug eines Sicherheitsnachweiskonzeptes für ein HAW-Endlager im Tonstein	92
02 E 11062A	Verbundprojekt: Modellierung von Datenungleichheiten auf hybriden Rechnern mit $d^3f$ und $r^3t$ (H-DUR)	98
02 E 11072A	Verbundprojekt WEIMAR: Weiterentwicklung des Smart- $K_d$ -Konzepts für Langzeitsicherheitsanalysen – Teilprojekt GRS	104
02 E 11102	Wissenschaftliche Grundlagen zum Nachweis der Langzeitsicherheit von Endlagern	112
02 E 11122	Entwicklung chemisch-hydraulischer Modelle für die Prognose des Langzeitverhaltens von Sorelbeton in Salzformationen – Kurztitel: LAVA	116
02 E 11132	Langzeitsicherer Schachtverschluss im Salinar – Kurztitel: LASA	118
02 E 11142	Performance Assessment of Sealing Systems – Kurztitel: PASS	120
02 E 11172	Studie zur Partitionierung und Transmutation (P&T) hochradioaktiver Abfälle	126
02 E 11182A	Sicherheitsanalytische Untersuchungen für ein Endlager für radioaktive Abfälle in einer diagenetisch überprägten Tonformation in der Nachbetriebsphase – SanToS	128
02 E 11203A	Verbundprojekt: Stabilität von kompaktiertem Bentonit zur Rückhaltung von Radionukliden in geklüfteten Systemen – Experimente und Modellierung, KOLLORADO-e	136
02 E 11213	Qualifizierung der Rechenprogramme $d^3f$ und $r^3t$ , Kurztitel Quader	140
02 E 11243	Langzeitsicherer Schachtverschluss im Salinar – Ergänzende laborative und modelltheoretische Untersuchungen zum HM-gekoppelten Re-kompaktionsverhalten der EDZ(LASA-EDZ)	146
02 E 11273	Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Vorprojekt (UMB-V)	152
<b>Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e.V. (FZD), Bautzner Landstraße 400 (B6), 01328 Dresden</b>		
02 E 10971	Verbundprojekt: Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im natürlichen Tongestein und in salinaren Systemen – Teilprojekt 2: Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf	74
02 E 11072B	Verbundprojekt WEIMAR: Weiterentwicklung des Smart- $K_d$ -Konzepts für Langzeitsicherheitsanalysen – Teilprojekt HZDR	106


**Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e.V. - Forschungsstelle Leipzig - Interdisziplinäre Isotopenforschung, Permoserstr. 15, 04318 Leipzig**

- 02 E 10790X Verbundprojekt: Verhalten langlebiger Spalt- und Aktivierungsprodukte im Nahfeld eines Endlagers und Möglichkeiten ihrer Rückholung (VESPA)  44


**IfG Institut für Gebirgsmechanik GmbH, Friederikenstr. 60, 04279 Leipzig**

- 02 E 10830 Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von Modellberechnungen zum thermo-mechanischen Verhalten und zur Verheilung von Steinsalz (TV2: IfG)  52


**Johannes Gutenberg-Universität Mainz, Saarstraße 21, 55122 Mainz**

- 02 E 10981 Verbundprojekt: Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im natürlichen Tongestein und in salinaren Systemen – Teilprojekt 3: Universität Mainz  76


**Johann Wolfgang Goethe-Universität Frankfurt am Main, Senckenberganlage 31, 60325 Frankfurt am Main**

- 02 E 11062C Verbundprojekt: Modellierung von Datenungewissheiten auf hybriden Rechnern mit  $d^3f$  und  $r^3t$  (H-DUR)  102


**Leibniz Universität Hannover, Welfengarten 1, 30167 Hannover**

- 02 E 10850 Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von Modellberechnungen zum thermo-mechanischen Verhalten und zur Verheilung von Steinsalz (TV4: LUH-IUB)  56





**Projektträger Karlsruhe Wassertechnologie und Entsorgung (PTKA-WTE), Hermann-von-Helmholtz-Platz 1, 76344 Eggenstein-Leopoldshafen**

- KWA 9005 Unterstützungsprogramm Alternative Wirtsgesteine  160

**Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg, Seminarstr. 2, 69117 Heidelberg**

- 02 E 11031 Verbundprojekt: Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im natürlichen Tongestein und in salinaren Systemen – Teilprojekt 8: Universität Heidelberg  86

**Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Hermann-von-Helmholtz-Platz 1, 76344 Eggenstein-Leopoldshafen**

- 02 E 10800 Verbundprojekt: Verhalten langlebiger Spalt- und Aktivierungsprodukte im Nahfeld eines Endlagers und Möglichkeiten ihrer Rückholung (VESPA)  46
- 02 E 10840 Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von Modellberechnungen zum thermo-mechanischen Verhalten und zur Verheilung von Steinsalz (TV3: KIT-INE)  54
- 02 E 10961 Verbundprojekt: Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im natürlichen Tongestein und in salinaren Systemen – Teilprojekt 1: Karlsruher Institut für Technologie  72
- 02 E 11203B Verbundprojekt: Stabilität von kompaktiertem Bentonit zur Rückhaltung von Radionukliden in geklüfteten Systemen – Experimente und Modellierung, KOLLORADO-e  138

<b>Technische Universität Bergakademie Freiberg, Akademiestraße 6, 09599 Freiberg</b>
---

- |             |  |       |
|-------------|--|-------|
| 02 E 10880  | Zusammenhang von Chemismus und mechanischen Eigenschaften des MgO-Baustoffs  | 📖 60  |
| 02 E 11092  | Gefügestabilisierter Salzgrusversatz (GESAV) – Phase 1   | 📖 110 |
| 02 E 11193A | Schachtverschlüsse für Endlager für hochradioaktive Abfälle (ELSA – Phase II): Konzeptentwicklung für Schachtverschlüsse und Test von Funktionselementen von Schachtverschlüssen | 📖 132 |

<b>Technische Universität Carolo-Wilhelmina zu Braunschweig, Pockelsstr. 14, 38106 Braunschweig</b>
---

- |            |   |      |
|------------|---|------|
| 02 E 10860 | Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von Modellberechnungen zum thermo-mechanischen Verhalten und zur Verheilung von Steinsalz (TV6: TUBS) | 📖 58 |
|------------|---|------|

<b>Technische Universität Clausthal, Adolph-Römer-Straße 2A, 38678 Clausthal-Zellerfeld</b>
---

- |            |  |       |
|------------|--|-------|
| 02 E 10820 | Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von Modellberechnungen zum thermo-mechanischen Verhalten und zur Verheilung von Steinsalz (TV5: TUC)   | 📖 50  |
| 02 E 11041 | Kopplung der Softwarecodes FLAC3D und TOUGH2 in Verbindung mit in situ-, laborativen und numerischen Untersuchungen zum thermisch-hydraulisch-mechanisch gekoppelten Verhalten in Tongestein unter Endlagerbedingungen                 | 📖 88  |
| 02 E 11051 | Optimierung der numerischen Effizienz von Verfahren zur Sensitivitätsanalyse im Hinblick auf Modelle zur Analyse der Langzeitsicherheit von Endlagern  | 📖 90  |
| 02 E 11223 | Langzeitsicheres Abdichtungselement aus Salzschnittblöcken - Vorprojekt zur Kalkulation und Qualifizierung der Forschungsarbeiten  | 📖 142 |
| 02 E 11253 | Strömungstechnischer Funktionsnachweis für Verschlussbauwerke im Steinsalz und deren flüssigkeitsgestützte Abdichtung – Phase I (Konzeption von Funktionsnachweis und Abdichtungsmethoden, Testung und Auswahl von Behandlungsfluiden) | 📖 148 |


<b>Technische Universität Dresden, Helmholtzstr. 10, 01069 Dresden</b>
--

- |            |   |      |
|------------|---|------|
| 02 E 11021 | Verbundprojekt: Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im natürlichen Tongestein und in salinaren Systemen – Teilprojekt 7: Technische Universität Dresden | 📖 84 |
|------------|---|------|


<b>Technische Universität München, Arcisstraße 21, 80333 München</b>
--

- |            |   |      |
|------------|---|------|
| 02 E 11001 | Verbundprojekt: Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im natürlichen Tongestein und in salinaren Systemen – Teilprojekt 5: Technische Universität München | 📖 80 |
|------------|---|------|

**Universität des Saarlandes, Campus Saarbrücken, 66123 Saarbrücken**

- 02 E 10991** Verbundprojekt: Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im natürlichen Tongestein und in salinaren Systemen – Teilprojekt 4: Universität des Saarlandes  78

**Universität Potsdam, Am Neuen Palais 10, 14469 Potsdam**

- 02 E 11011** Verbundprojekt: Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im natürlichen Tongestein und in salinaren Systemen – Teilprojekt 6: Universität Potsdam  82