

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

PTE-E Nr. 65

BMUV geförderte FuE-Vorhaben zur
„Endlagerung radioaktiver Abfälle“

Berichtszeitraum: 01. Januar – 30. Juni 2023

Projektträger Karlsruhe (PTKA)
Entsorgung

Oktober 2023

PTE-Berichte

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

Die Fortschrittsberichtsreihen behandeln folgende Themenschwerpunkte:

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

Die Fortschrittsberichtsreihen sind online verfügbar:

www.ptka.kit.edu/ptka-alt/wte/287.php

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

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

Bis Ende des Jahres 2016 wurde in dieser Fortschrittsberichtsreihe auch über die BMBF-geförderte FuE zu Stilllegung und Rückbau kerntechnischer Anlagen informiert. Seit 01.10.2016 wird dieser Förderschwerpunkt durch den Projektträger GRS betreut.

Vorwort

Im Auftrag des Bundesministeriums für Bildung und Forschung (BMBF) und des Bundesministeriums für Umwelt, Naturschutz, nukleare Sicherheit und Verbraucherschutz (BMUV)¹ arbeitet das KIT seit 1991 als Projektträger auf dem Gebiet der „nuklearen Entsorgung“.

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

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

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

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

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

Der Bericht ist wie folgt gegliedert:

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

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

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

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

¹ Die Zuständigkeit für die projektgeförderte nukleare Sicherheits- und Entsorgungsforschung wurde mit Organisationserlass vom 8.12.2021 dem BMUV übertragen.



Inhaltsverzeichnis


1	Verzeichnis der Vorhaben gemäß FuE-Bereiche.....	1
C	Forschungsgebiet Endlagerung.....	1
C1	Standortauswahl.....	1
C2	Sicherheits- und Endlagerkonzepte; Endlagertechnik und (geo-)technische Barrieren.....	3
C3	Sicherheitsnachweis.....	9
D	Querschnittsaufgaben.....	12
D1	Wissens- und Kompetenzmanagement.....	12
D2	Sozio-technische Fragestellungen.....	13
D3	Kernmaterialüberwachung (Safeguards).....	15
2	Formalisierte Zwischenberichte	16
2.2	VORHABEN BEREICH C.....	16
2.3	VORHABEN BEREICH D.....	166
	Information zu Publikationen sowie zu Aus- und Weiterbildung.....	198
3	Verzeichnis der Forschungsstellen.....	199

1 Verzeichnis der Vorhaben gemäß FuE-Bereiche

C Forschungsgebiet Endlagerung











C1 Standortauswahl

02 E 11829	Tonsteinforschung im Felslabor Mont Terri ab Phase 25 (MonTe-25)	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln	 38
02 E 11931	Einfluss der thermischen Reife auf die gekoppelten hydro-mechanischen Eigenschaften niedrig-durchlässiger Tonsteine – Feld & Laborskala (Maturity)	Rheinisch-Westfälische Technische Hochschule Aachen	 88
02 E 11991	Entwicklung und Validation einer neuartigen Versuchstechnik für triaxiale Kriechversuche bei geringer deviatorischer Belastung (KRIECHTECH)	TU Clausthal, Clausthal-Zellerfeld	 113
02 E 12052A	Verbundprojekt: Konkurrenz und Reversibilität bei Sorptionsvorgängen (KuRSiv), Teilprojekt A	Helmholtz-Zentrum Dresden - Rossendorf e. V.	 133
02 E 12052B	Verbundprojekt: Konkurrenz und Reversibilität bei Sorptionsvorgängen (KuRSiv), Teilprojekt B	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH	 135
02 E 12052C	Verbundprojekt: Konkurrenz und Reversibilität bei Sorptionsvorgängen (KuRSiv), Teilprojekt C	Karlsruher Institut für Technologie (Großforschungsaufgabe)	 137
02 E 12062A	Verbundprojekt: Spannungsprognosen – Quantifizierung und Reduzierung von Ungewissheiten mit geomechanisch-numerischen Untergrundmodellen (SQuaRe), Teilprojekt A: Ungewissheiten durch Materialparameter, Diskretisierung, Initial- und Randbedingungen	Technische Universität Darmstadt	 139
02 E 12062B	Verbundprojekt: Spannungsprognosen – Quantifizierung und Reduzierung von	Helmholtz-Zentrum Potsdam Deutsches GeoForschungsZentrum GFZ	 141








	Ungewissheiten mit geomechanisch-numerischen Untergrundmodellen (SQuaRe), Teilprojekt B: Bayesischer Ansatz zur Kalibrierung geomechanisch-numerischer Modelle mit Reduzierung von Ungewissheiten		
02 E 12062C	Verbundprojekt: Spannungsprognosen – Quantifizierung und Reduzierung von Ungewissheiten mit geomechanisch-numerischen Untergrundmodellen (SQuaRe), Teilprojekt C: Ungewissheiten durch geometrische Parameter, Erstellung von Ersatzmodellen durch Methoden der künstlichen Intelligenz	Rheinisch-Westfälische Technische Hochschule Aachen	 143

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

02 E 11577A	Verbundprojekt: Sicherheitsanalytische Untersuchungen zu Endlagersystemen im Kristallin (SUSE), Teilprojekt A	BGE Technology GmbH, Peine	📖 20
02 E 11577B	Verbundprojekt: Sicherheitsanalytische Untersuchungen zu Endlagersystemen im Kristallin (SUSE), Teilprojekt B	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln	📖 22
02 E 11627	Arteigene Versatz- und Verschlussmaterialien für die Endlagerung hochradioaktiver Abfälle in Tonformationen (AVET)	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln	📖 24
02 E 11698	Untersuchung thermisch-hydraulisch-mechanisch-chemischer Einwirkungen auf zementbasierte Dichtelemente (THYMECZ)	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln	📖 28
02 E 11799A	Verbundprojekt: Vertikales hydraulisches Dichtsystem nach dem Sandwich-Prinzip - Hauptprojekt (SANDWICH-HP), Teilprojekt A	Karlsruher Institut für Technologie (KIT)	📖 30
02 E 11799B	Verbundprojekt: Vertikales hydraulisches Dichtsystem nach dem Sandwich-Prinzip - Hauptprojekt (SANDWICH-HP), Teilprojekt B	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln	📖 32
02 E 11799C	Verbundprojekt: Vertikales hydraulisches Dichtsystem nach dem Sandwich-Prinzip - Hauptprojekt (SANDWICH-HP), Teilprojekt C	Technische Universität Bergakademie Freiberg	📖 34
02 E 11819	Mineralumwandlung und Sorption bei erhöhten Temperaturen in geklüfteten Kristallingesteinen und Barrierematerial (MUSE)	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln	📖 36
02 E 11839	Entwicklung eines Leitfadens zur Auslegung und zum Nachweis von geotechnischen Barrieren für ein HAW Endlager in Salzformationen (RANGERS)	BGE Technology GmbH, Peine	📖 40

02 E 11870A	Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt A	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln	 60
02 E 11870B	Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt B	Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e. V., Dresden	 62
02 E 11870C	Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt C	Universität Greifswald	 64
02 E 11870D	Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt D	TU München	 66
02 E 11870E	Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt E	Leibniz Universität Hannover	 68
02 E 11870F	Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt F	Leibniz Universität Hannover	 70
02 E 11880	Sicherheitsrelevante Untersuchungen zur Bentonitaufsättigung (SIRUB)	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln	 72
02 E 11900	Langzeitsicherheit von Verschlussystemen in Schächten und Rampen im Vergleich (LARYSSA)	BGE Technology GmbH, Peine	 78
02 E 11911A	Verbundprojekt: Vorhersage der heterogenen Radionuklidsorption auf Kluft- und Störungsflächen in granitischen Gesteinen: Parametrisierung und Validierung verbesserter reaktiver Transportmodelle (WTZ-Granit), Teilprojekt A	Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e. V., Dresden	 80
02 E 11911B	Verbundprojekt: Vorhersage der heterogenen Radionuklidsorption auf Kluft- und Störungsflächen in	Friedrich-Schiller-Universität Jena	 82

	granitischen Gesteinen: Parametrisierung und Validierung verbesserter reaktiver Transportmodelle (WTZ-Granit), Teilprojekt B		
02 E 11921A	Verbundprojekt: Untersuchungen zur SEParation von AMericiem aus hochradioaktiven Abfalllösungen (SEPAM), Teilprojekt A	Forschungszentrum Jülich GmbH	📖 84
02 E 11921B	Verbundprojekt: Untersuchungen zur SEParation von AMericiem aus hochradioaktiven Abfalllösungen (SEPAM), Teilprojekt B	Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Eggenstein- Leopoldshafen	📖 86
02 E 11951A	Verbundprojekt: Kompaktion von Salzgrus für den sicheren Einschluss - Phase 2 (KOMPASS II), Teilprojekt A	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln	📖 92
02 E 11951B	Verbundprojekt: Kompaktion von Salzgrus für den sicheren Einschluss - Phase 2 (KOMPASS II), Teilprojekt B	BGE Technology GmbH, Peine	📖 94
02 E 11951C	Verbundprojekt: Kompaktion von Salzgrus für den sicheren Einschluss - Phase 2 (KOMPASS II), Teilprojekt C	IfG Institut für Gebirgsmechanik GmbH, Leipzig	📖 97
02 E 11951D	Verbundprojekt: Kompaktion von Salzgrus für den sicheren Einschluss - Phase 2 (KOMPASS II), Teilprojekt D	TU Clausthal, Clausthal- Zellerfeld	📖 99
02 E 11961	Entwicklung eines salzgrusbasierten Versatzkonzepts unter der Option Rückholbarkeit - Phase 1 (SAVER)	Technische Universität Bergakademie Freiberg	📖 101
02 E 11971A	Verbundprojekt: Anwendbarkeit von Niedertemperatur-Salzschnmelzen für Verschlussmaßnahmen von Endlagern für radioaktiver Abfälle im Wirtsgestein Salz (SaIVE), Teilprojekt A	Technische Universität Bergakademie Freiberg	📖 103
02 E 11971B	Verbundprojekt: Anwendbarkeit von Niedertemperatur-Salzschnmelzen für Verschlussmaßnahmen von	BGE Technology GmbH, Peine	📖 105









	Endlagern für radioaktiver Abfälle im Wirtsgestein Salz (SalVE), Teilprojekt B		
02 E 11981A	Verbundprojekt: Implementierung eines Monitoringsystems zur Evaluierung der Korrosionsvorgänge an Behältermaterialien in Bentonit-basierten Endlagerkonzepten (IMKORB), Teilprojekt A	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln	 107
02 E 11981B	Verbundprojekt: Implementierung eines Monitoringsystems zur Evaluierung der Korrosionsvorgänge an Behältermaterialien in Bentonit-basierten Endlagerkonzepten (IMKORB), Teilprojekt B	Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Eggenstein-Leopoldshafen	 109
02 E 11981C	Verbundprojekt: Implementierung eines Monitoringsystems zur Evaluierung der Korrosionsvorgänge an Behältermaterialien in Bentonit-basierten Endlagerkonzepten (IMKORB), Teilprojekt C	Leibniz Universität Hannover	 111
02 E 12001A	Verbundprojekt: Sandwich Support Projekt 1: Heterogene Bentonithydratation (SANDWICH-SP1), Teilprojekt A	Karlsruher Institut für Technologie (KIT)	 115
02 E 12001B	Verbundprojekt: Sandwich Support Projekt 1: Heterogene Bentonithydratation (SANDWICH-SP1), Teilprojekt B	Ruhr-Universität Bochum	 117
02 E 12072A	Verbundprojekt: MgO-Beton C3 als langzeitbeständiges und schnellwirksames Verschlusselement für Schachtverschlüsse zukünftiger HAW-Endlager im Salinar (MgO-C3), Teilprojekt A	Technische Universität Bergakademie Freiberg	 145
02 E 12072B	Verbundprojekt: MgO-Beton C3 als langzeitbeständiges und schnellwirksames Verschlusselement für Schachtverschlüsse zukünftiger HAW-Endlager im Salinar (MgO-C3), Teilprojekt B	Helmholtz-Zentrum Dresden - Rossendorf e. V	 147



02 E 12092	Recherche und Beschreibung für das Endlagerbehältersystem in Frage kommende Materialien (ElaBeMa)	Leibniz Universität Hannover	📖 149
02 E 12102	Entwicklung einer selbstlernenden Modellierungsmethodik zu geomechanischen und geotechnischen Prozessen am Beispiel der Planungs- und Auffahrungsphase einer Einlagerungsstrecke eines Tiefenlagers (SEMOTI)	Technische Universität Carolo-Wilhelmina zu Braunschweig	📖 153
02 E 12112A	Verbundprojekt: Systematic sensitivity analysis for mechanistic geochemical models using field data from crystalline rock (SANGUR), Teilprojekt A	Helmholtz-Zentrum Dresden - Rossendorf e. V.	📖 155
02 E 12112B	Verbundprojekt: Systematic sensitivity analysis for mechanistic geochemical models using field data from crystalline rock (SANGUR), Teilprojekt B	Technische Universität Clausthal	📖 157
02 E 12122A	Verbundprojekt: Stabilität von Mineralphasen des Eisens im Nahfeld eines Endlagers (STAMINA), Teilprojekt A	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH	📖 159
02 E 12122B	Verbundprojekt: Stabilität von Mineralphasen des Eisens im Nahfeld eines Endlagers (STAMINA), Teilprojekt B	Karlsruher Institut für Technologie (Großforschungsaufgabe)	📖 161
02 E 12153A	Verbundprojekt: Erosion von Bentonit unter In-situ Bedingungen durch Einwirkung natürlicher Wässer in geologischen Tiefenlagern (EVIDENT), Teilprojekt A	Friedrich-Schiller-Universität Jena	📖 163
02 E 12153B	Verbundprojekt: Erosion von Bentonit unter In-situ Bedingungen durch Einwirkung natürlicher Wässer in geologischen Tiefenlagern (EVIDENT), Teilprojekt B	Karlsruher Institut für Technologie (Großforschungsaufgabe)	📖 164
02 E 12153C	Verbundprojekt: Erosion von Bentonit unter In-situ Bedingungen durch Einwirkung natürlicher Wässer in	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH	📖 165

	geologischen Tiefenlagern (EVIDENT), Teilprojekt C		

C3 Sicherheitsnachweis

02 E 11466	Entwicklung von Rechenmodulen für die integrierte Modellierung von Transportprozessen im einschlusswirksamen Gebirgsbereich (RepoTREND+)	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln	 17
02 E 11668A	Verbundprojekt: Smart-K _d in der Langzeitsicherheitsanalyse - Anwendungen (SMILE), Teilprojekt A	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln	 26
02 E 11860A	Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt A	Johannes Gutenberg-Universität Mainz	 42
02 E 11860B	Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt B	Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e. V.	 44
02 E 11860C	Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt C	Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Eggenstein-Leopoldshafen	 46
02 E 11860D	Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt D	Universität des Saarlandes	 48
02 E 11860E	Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt E	TU München	 51
02 E 11860F	Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt F	Universität Potsdam	 53
02 E 11860G	Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt G	TU Dresden	 55

02 E 11860H	Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt H	Universität Heidelberg	 58
02 E 11890A	Verbundprojekt: Entwicklung und Test eines erweiterten Hoek-Brown Stoffmodells zur Berücksichtigung anisotropen Festigkeitsverhaltens bei der Anwendung der Integritätskriterien für kristalline Wirtsgesteine (BARIK), Teilprojekt A	BGE Technology GmbH, Peine	 74
02 E 11890B	Verbundprojekt: Entwicklung und Test eines erweiterten Hoek-Brown Stoffmodells zur Berücksichtigung anisotropen Festigkeitsverhaltens bei der Anwendung der Integritätskriterien für kristalline Wirtsgesteine (BARIK), Teilprojekt B	Technische Universität Bergakademie Freiberg	 76
02 E 11941	Wissenschaftliche Grundlagen zum Nachweis der Langzeitsicherheit von Endlagern (WiGru-9)	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln	 90
02 E 12012A	Verbundprojekt: Weiterentwicklung von d ^{3f++} : Hydrogeologische Modellierung im regionalen Maßstab (HYMNE II), Teilprojekt A	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH	 119
02 E 12012B	Verbundprojekt: Weiterentwicklung von d ^{3f++} : Hydrogeologische Modellierung im regionalen Maßstab (HYMNE II), Teilprojekt B	Johann Wolfgang Goethe-Universität Frankfurt am Main	 121
02 E 12022A	Verbundprojekt: Internationales Benchmarking zur Verifizierung und Validierung von TH ² M-Simulatoren insbesondere im Hinblick auf fluiddynamische Prozesse in Endlagersystemen - Erweiterung auf multiphysikalische Ansätze und mehrdimensionale Modellgeometrien (BenVaSim II), Teilprojekt A	Technische Universität Clausthal	 123
02 E 12022B	Verbundprojekt: Internationales Benchmarking zur Verifizierung und Validierung von TH ² M-Simulatoren insbesondere im Hinblick auf fluiddynamische Prozesse in Endlagersystemen - Erweiterung auf multiphysikalische Ansätze und	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH	 125


	mehrdimensionale Modellgeometrien (BenVaSim II), Teilprojekt B		
02 E 12032	Methoden zur experimentellen und numerischen Analyse der geologischen Barriere eines Endlagers in tonreichen Sedimentgesteinsformationen (MAGNUS)	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH	 127
02 E 12042A	Verbundprojekt: Erarbeitung einer Methodik zur systematischen Ableitung von zu erwartenden und abweichenden Entwicklungen im Kristallingestein in Deutschland und exemplarische Anwendung als Grundlage zur Bewertung des sicheren Einschlusses unter Berücksichtigung von Optimierungsmaßnahmen (CHRISTA III), Teilpr. A	BGE TECHNOLOGY GmbH	 129
02 E 12042B	Verbundprojekt: Erarbeitung einer Methodik zur systematischen Ableitung von zu erwartenden und abweichenden Entwicklungen im Kristallingestein in Deutschland und exemplarische Anwendung als Grundlage zur Bewertung des sicheren Einschlusses unter Berücksichtigung von Optimierungsmaßnahmen (CHRISTA III), Teilpr. B	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH	 131
02 E 12082	Langzeitsicheres Abdichtungselement aus Salzschnittblöcken - Durchführung, Auswertung und Reanalyse von THM-Versuchen unter triaxialer Extensionsbeanspruchung (SSBVIER)	Technische Universität Clausthal	 151

D Querschnittsaufgaben

D1 Wissens- und Kompetenzmanagement

D2 Sozio-technische Fragestellungen

02 E 11849A	Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt A	TU Clausthal, Clausthal-Zellerfeld	167
02 E 11849B	Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt B	Christian-Albrechts-Universität zu Kiel	170
02 E 11849C	Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt C	Freie Universität Berlin	173
02 E 11849D	Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt D	Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Eggenstein-Leopoldshafen	175
02 E 11849E	Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt E	Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Eggenstein-Leopoldshafen	177
02 E 11849F	Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt F	Leibniz Universität Hannover	180
02 E 11849G	Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt G	Öko-Institut. Institut für angewandte Ökologie e. V.	183
02 E 11849H	Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt H	TU Berlin	185
02 E 11849I	Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt I	TU Carolo-Wilhelmina zu Braunschweig	188

02 E 11849J	Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt J	Universität Kassel	 190

D3 Kernmaterialüberwachung

02 W 6279	Neu- und Weiterentwicklung von Konzepten, Methoden und Techniken für die internationale Kernmaterialüberwachung, insbesondere im Rahmen der nuklearen Entsorgung (SAFEGUARDS-3)	Forschungszentrum Jülich	📖 193
02 W 6281	Antineutrino-Detektion zur Überwachung radioaktiver Abfälle (NU-SAFEGUARDS)	Rheinisch-Westfälische Technische Hochschule Aachen	📖 195

2 Formalisierte Zwischenberichte

2.1 Vorhaben Bereich C1 – C3

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 11466
Vorhabensbezeichnung: Entwicklung von Rechenmodulen für die integrierte Modellierung von Transportprozessen im einschlusswirksamen Gebirgsbereich (RepoTREND+)		
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept des BMWi 2015-2018: FuE-Bereich 4, FuE-Feld 4.3 Systemanalysen und Werkzeuge der Sicherheitsanalysen: Weiterentwicklung und Aktualisierung der Methoden und Rechenprogramme für Langzeitsicherheitsanalysen.		
Laufzeit des Vorhabens: 01.04.2016 bis 31.07.2024	Berichtszeitraum: 01.01.2023 bis 30.06.2023	
Gesamtkosten des Vorhabens: 3.466.655,00 EUR	Projektleiter: Reiche, Tatiana	

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

Das Arbeitsprogramm gliedert sich in sechs Arbeitspakete:

Arbeitspaket 1: Anforderungsanalyse und Wissensmanagement. Anforderungen werden ermittelt, spezifiziert, analysiert, strukturiert, abgestimmt und bewertet. Das Wissensmanagement umfasst sowohl interne Maßnahmen (wie Know-How-Transfer durch interne Diskussionsrunden) als auch das Einbeziehen des Know-Hows von externen Experten (z. B. durch die Teilnahme an fachlichen Konferenzen).

Arbeitspaket 2: Vorarbeiten für die Codeentwicklung. Neue Konzepte und Modelle müssen erstellt werden: konzeptionelles, mathematisches und numerisches Modell des Nahfeldmoduls, Entwurf der Softwarearchitektur, Entwurf einzelner Programmkomponenten, Optimierungskonzepte.

Arbeitspaket 3: Codeentwicklung. Umsetzung der in AP2 erarbeiteten Konzepte in einen Programmcode.

Arbeitspaket 4: Test, Qualitätssicherung, Dokumentation. Umfangreiche Tests werden in allen Programmentwicklungsphasen durchgeführt. Die folgenden QS-Maßnahmen werden umgesetzt: Standardisierung der Arbeitsprozesse, Versions- und Konfigurationsmanagement, Release-Freigabe, Bugtracking, Lokalisierung von Problemen,

Programmkommentare, Konventionen, Review des Programmcodes. Die gesamte Entwicklung über alle Phasen wird ausführlich dokumentiert.

Arbeitspaket 5: Verfolgung von Anforderungen aus aktuell laufenden FuE-Projekten. Die Anforderungen aus den aktuell laufenden FuE-Projekten werden aufgenommen und so weit analysiert, dass eine Entscheidung getroffen werden kann, ob eine Anforderung bei der aktuellen Entwicklung berücksichtigt werden kann oder später, im Rahmen eines separaten Projekts bzw. Arbeitspakets, realisiert werden soll.

Arbeitspaket 6: Berichte zum Projektfortschritt. Alle durchgeführten Arbeiten und erzielten Ergebnisse werden in Halbjahres- und Jahresberichten sowie im Abschlussbericht dokumentiert.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Arbeitspaket 1

Zur Erweiterung des Kenntnisstands auf dem Gebiet der Strömungs- und Transportprozesse in porösen Medien wurde an der internationalen Konferenz InterPore 2023 vom 22.05. bis 25.05. (in Edinburgh) teilgenommen. Auf der Konferenz wurde der aktuelle Stand von RepoTREND vorgestellt.

Arbeitspaket 2

Folgende Konzepte wurden entwickelt:

- Bereitstellung von Phasendaten für die Berechnung eines Radionuklidtransports,
- Radioaktiver Zerfall unter der Berücksichtigung von Radionuklidkette unter den zweiphasigen Bedingungen,
- Randbedingungen für Radionuklide
- Ausgabe der Daten, die an ein weiterführendes Rechenmodul übergeben werden sollen, an der Schnittstelle des modellierten Systems mit der Umgebung.

Im Rahmen der Pflege des Statistikrahmens wurde eine Erweiterung der Methode PAWN erarbeitet und deren Integration in das Auswerteprogramm RepoSUN vorbereitet.

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

Beim Berechnen des Schadstofftransports wurden spezifische numerische Probleme festgestellt, die u. a. auf Rechnerarithmetik und Rundungsfehler zurückzuführen sind. Es wurden Konzepte zur Behebung dieser Probleme entwickelt. Ebenfalls wurden Konzepte zur verbesserten Fehlerdiagnose entwickelt.

Arbeitspaket 3

Die Umsetzung von bereits existierenden Konzepten wurde fortgesetzt. Die Umsetzung der neu entwickelten, im vorigen Absatz genannten Konzepte ist fortgeschritten.

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

Arbeitspaket 4

Zum Validieren von NaTREND soll ein konzeptuell einfaches und möglichst gut kontrollierbares Experiment im geotechnischen Labor durchgeführt werden. Im Berichtszeitraum wurde ein Probenmaterial mit einem eng begrenzten Kornspektrum (Durchmesser zwischen 45 und 50 μm) vorbereitet. Das Prinzip einer angemessenen Versuchszelle wurde entwickelt. Die Zelle ist zurzeit in der Fertigung.

Es wurden Testrechnungen zum Radionuklidtransport konzipiert und durchgeführt.

Die vorhandene Bibliothek von automatischen Testfällen wurde entsprechend der aktuellen Entwicklung angepasst und durch neue Testfälle erweitert.

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

Arbeitspaket 6

Der vorliegende Bericht wurde erstellt.

4. Geplante weitere Arbeiten

Im nächsten Halbjahr soll überwiegend an AP3 und AP4 gearbeitet werden, wobei der Schwerpunkt bei der Performanceverbesserung, Stabilisierung und bei der Durchführung des geplanten Laborversuchs liegen soll.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Tatiana Reiche: *RepoTREND* – A Program Package for Safety Analysis of a Final Repository for Radioactive Waste, 22.-25. Mai, 2023, Edinburgh (Scotland).

Auftragnehmer: BGE TECHNOLOGY GmbH, Eschenstraße 55, 31224 Peine		Förderkennzeichen: 02 E 11577A	
Vorhabensbezeichnung: Sicherheitsanalytische Untersuchungen zu Endlagersystemen im Kristallin (SUSE)			
Zuordnung zum FuE-Programm: FuE-Feld 2.2: Charakterisierung des Geosystems FuE-Feld 3.3: Geotechnische Barrieren FuE-Feld 4.1: Phänomene, Prozesse und Modelle FuE-Feld 4.2: Methodische Grundlagen der Nachweisführung FuE-Feld 4.3: Systemanalysen und Werkzeuge der Sicherheitsanalysen			
Laufzeit des Vorhabens: 01.06.2017 bis 29.02.2024		Berichtszeitraum: 01.01.2023 bis 30.06.2023	
Gesamtkosten des Vorhabens: 1.502.960,74 EUR		Projektleiter: Dr. Christian Müller	

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

- AP 1: Bemessung des geotechnischen Verschlussystems
- AP 2: Gesteinseignungsklassifikationen als Positionierungskriterien für Dichtelemente, Bohrlöcher und Auffahrungen im Kristallin
- AP 3: Charakterisierung eines Kluft- und Störungszonennetzwerkes am Beispiel des Standortes Yeniseysky
- AP 4: Erhebung zusätzlicher Daten an Probenmaterial aus dem Gebiet Yeniseysky
- AP 5: Regionale 3D-Strömungs- und Transportmodelle
- AP 6: Bewertung und Dokumentation
- AP 7: Unterstützung bei der methodischen Planung des Untertagelabors und Spezifizierung des In-Situ-Forschungs- und Entwicklungsbedarfs

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP5: Das Hauptziel dieses Arbeitsprojekts besteht darin, mehrere Modellierungsansätze zu vergleichen, die üblicherweise für die Simulation von Strömungs- und Transportprozessen in geklüfteten Gesteinen verwendet werden. Durch diese Benchmark-Modellierungen sollen die Unsicherheiten charakterisiert werden, die bei der Implementierung des numerischen Modells aus dem geologischen Modell auftreten und mit dem jeweiligen Modellierungsansatz verbunden sind. Die Benchmark-Modellierungen variieren hauptsächlich in Bezug auf die Anzahl der berücksichtigten Brüche sowie die simulierten physikalischen Prozesse. Während die ersten drei Tests sich auf die Analyse advektiver Strömung konzentrieren, werden in den letzten drei Tests auch Stofftransportprozesse einbezogen.

Die Arbeiten im Berichtszeitraum beschränken sich vorwiegend auf die Rechenfälle 4, 5 und 6 welche einen Stofftransport berücksichtigen. Um (negative) Merkmale der jeweiligen Ansätze auszuschließen (z.B. Treppenstufen im *fracture continuum* Ansatz), wurde in einem ersten Schritt ein Modell mit einer horizontalen Kluft mit dem *fracture continuum* Ansatz und mit dem *discrete fracture network* (DFN) basierendem Ansatz erstellt, parametrisiert und mit der analytischen Lösung verglichen. Die beiden Ansätze zeigen eine gute Übereinstimmung mit der analytischen Lösung. Allerdings ist eine deutliche Verfeinerung der Diskretisierung im Kluft-Matrix-Bereich nötig. Im nächsten Schritt wurde der Rechenfall 4, welcher eine 30° geneigte Einzelkluft beinhaltet, mit dem *fracture continuum* Ansatz und mit dem *discrete fracture network* (DFN) basierendem Ansatz umgesetzt. Die Kluftneigung führt im *fracture continuum* Ansatz zu einer treppenstufenartigen Geometrie, die lokal zwangsläufig zu heterogenen Strömungsgeschwindigkeiten und vom Neigungswinkel abweichenden Strömungsvektoren führt. In der Auswertung der Konzentration über die Kluftfläche (für verschiedene Zeitpunkte) sind diese Heterogenitäten in kleineren Schwankungen sichtbar. Ungeachtet dessen ist sowohl für den *fracture continuum* Ansatz als auch für den *discrete fracture network* (DFN) basierendem Ansatz eine sehr gute Übereinstimmung mit der analytischen Lösung feststellbar.

AP6: Mit den Projektpartnern GRS und BGR wurde eine erste Gliederung des Abschlussberichtes erarbeitet und festgelegt.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP5: Auswertung und Diskussion der Ergebnisse der Benchmarkberechnungen für die Rechenfälle 5 und 6. Finalisierung der Dokumentation zu den Benchmarkberechnungen.

AP6: Anfertigung des Abschlussberichtes

5. Berichte, Veröffentlichungen

-

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 11577B	
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Sicherheitsanalytische Untersuchungen zu Endlagersystemen im Kristallin (SUSE), Teilprojekt B			
Zuordnung zum FuE-Programm: C2.1: Sicherheits- und Endlagerkonzepte, Punkt 3 FuE-Feld C3.1: Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-)Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung, Punkt 1, 2 FuE-Feld C3.3: Werkzeuge der Sicherheitsanalysen, Punkt 2			
Laufzeit des Vorhabens: 01.06.2017 bis 29.02.2024		Berichtszeitraum: 01.01.2023 bis 30.06.2023	
Gesamtkosten des Vorhabens: 2.061.288,00 EUR		Projektleiterin: Dr. Judith Flügge	

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

Bei der Durchführung des Vorhabens werden folgende Arbeitspakete bearbeitet:

AP 1: Bemessung des geotechnischen Verschlussystems

AP 2: Gesteinseignungsklassifikationen als Positionierungskriterien für Dichtelemente, Bohrlöcher und Auffahrungen im Kristallin

AP 3: Charakterisierung eines Kluft- und Störungszonennetzwerkes am Beispiel des Standortes Yeniseysky

AP 4: Erhebung zusätzlicher Daten an Probenmaterial aus dem Gebiet Yeniseysky

AP 5: Regionale 3D-Strömungs- und Transportmodelle

AP 6: Bewertung und Dokumentation

AP 7: Unterstützung bei der methodischen Planung des Untertagelabors und Spezifizierung des In-situ-Forschungs- und Entwicklungsbedarfs

Die GRS ist federführend in den AP 4 und AP 5.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Zur Diskussion der Ergebnisse und zur Absprache der weiteren Arbeiten wurden am 08.02.2023, 07.03.2023, 24.03.2023, 14.04.2023, 05.05.2023 und 24.05.2023 Arbeitstreffen der Verbundpartner per Videokonferenz, v. a. zur Diskussion der Ergebnisse aus AP3 und AP5, durchgeführt. Am 28.06.2023 fand ein gemeinsames Arbeitsgespräch statt, bei dem die Ergebnisse aller Arbeitspakete vorgestellt und die noch durchzuführenden Arbeiten diskutiert wurden.

AP 4: Als Ersatz für die nicht verfügbaren russischen Proben wurden nach Absprache mit PTKA von SÚRAU drei Proben aus dem UTL Bukov – zwei Kalzitfüllungen mit dem angrenzenden Migmatit und ein ungestörter Migmatit – an die BGR im Oktober 2022 geliefert. Diese Proben wurden von der BGR charakterisiert. Es stellte sich heraus, dass der vermeintlich ungestörte Migmatit durch feine Kalzitader durchsetzt ist, daher werden im Weiteren nur zwei Kalzitfüllungen und zwei angrenzende Alterationszonen (im Migmatit) untersucht. Die relevanten Unterproben sind im Braunschweiger GRS-Labor zur Probenvorbereitung eingetroffen. Es wurde ein Vorversuch durchgeführt, in dem Einfluss eines Reduktionsmittels auf die Freisetzung von Seltenerden aus der Kalzitfüllung quantifiziert wird. Die detaillierte Versuchsplanung für die im GRS-Labor durchzuführenden Untersuchungen wurde angepasst.

AP 5: Die Modellierung der Benchmarks wurde weitergeführt. Der Fokus der Arbeiten lag auf der Modellierung des Stofftransports (Rechenfälle 4, 5 und 6). Zunächst wurde ein Würfelmodell mit einer einzelnen horizontalen Kluft mit dem *fracture continuum*-Ansatz und mit dem *discrete fracture network* (DFN) basiertem Ansatz erstellt, parametrisiert und die Ergebnisse mit der analytischen Lösung verglichen. Die beiden Ansätze zeigen eine gute Übereinstimmung mit der analytischen Lösung, jedoch nur bei einer deutlichen Verfeinerung am Übergang zwischen Kluft und Matrix. Bei einer geneigten Einzelkluft führt der *fracture continuum*-Ansatz zu einer treppenstufenartigen Repräsentation der Kluft im Modell, was zu einem heterogenen Strömungsfeld mit lokalen Abweichungen der Strömungsrichtung von der Kluftneigung und Schwankungen der Konzentrationsverteilung entlang der Kluffläche führt. Sowohl der *fracture continuum*-Ansatz als auch der *discrete fracture network*-Ansatz zeigen insgesamt gute Übereinstimmungen mit der analytischen Lösung.

AP6: Eine erste Gliederung des Abschlussberichtes wurde mit BGETEC und BGR festgelegt.

4. Geplante Weiterarbeiten

Weitere Arbeitsgespräche zwischen den deutschen Projektpartnern und zur Diskussion der Laborarbeiten mit SÚRAO sind vorgesehen.

AP 4: Durchführung von Auslaugungszeitreihen mit einer wässrigen Lösung bei 10/80 °C, Extraktionen mit 0,1 M HCl sowie Aufschlüssen mit 18%tiger HCl, dem Königswasser und der Tetrafluoroborsäure (HBF₄) mit den Proben aus dem UTL Bukov sowie von dazugehörigen ICP-MS/MS-, ICP-OES- und TIC/TOC-Messungen. Berechnung von Desorptions-Kd-Werten für die Seltenerden und Y sowie Cs, Sr, Ba, Ni, Th, U und I und Identifizierung ihrer möglichen assoziierten Mineralphasen. Zusammenführen dieser Ergebnisse mit den Ergebnissen der Mikrostrukturuntersuchungen der BGR.

AP 5: Auswertung und Diskussion der Ergebnisse der Benchmarkberechnungen für die Rechenfälle 5 und 6. Finalisierung der Dokumentation zu den Benchmarkberechnungen.

AP 6: Dokumentation der Ergebnisse im Abschlussbericht

5. Berichte, Veröffentlichungen

- keine

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 11627	
Vorhabensbezeichnung: Arteigene Versatz- und Verschlussmaterialien für die Endlagerung hochradioaktiver Abfälle in Tonformationen (AVET)			
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept des BMWi 2015 - 2018: FuE-Bereich 3: „Endlagerkonzepte und Endlagertechnik“ und FuE-Feld 3.3 „Geotechnische Barrieren“			
Laufzeit des Vorhabens: 01.11.2017 bis 31.05.2024		Berichtszeitraum: 01.01.2023 bis 30.06.2023	
Gesamtkosten des Vorhabens: 1.813.589,00 EUR		Projektleiter: Dr.-Ing. Chun-Liang Zhang	

1. Vorhabenziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Das Vorhaben zur Untersuchung der Eignung arteigener Versatz-/Verschlussmaterialien für HAW-Endlager im Tongestein hat das Ziel, geotechnische Eigenschaften von Ausbruchmaterial aus dem Opalinuston (ist den in einem deutschen Endlager zu erwartenden Wirtsgestein am ähnlichsten – Standortmodell SÜD) und des Gemisches mit Bentonitzusatz experimentell zu bestimmen und die Eignung als Versatz- und Verschlussmaterialien zu analysieren. Dadurch soll ein verbessertes Verständnis für das Materialverhalten erreicht und eine Grundlage für eine belastbare Prognose der Langzeitprozesse im Versatz- und Verschlussystem mit Blick auf die langfristige Abdichtung eines Endlagers in einer Tonsteinformation geschaffen werden. Damit leistet das Projekt einen Beitrag zur Absicherung der Grundlagen für die Langzeitsicherheitsanalyse von HAW-Endlagern in Deutschland.

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

Laboruntersuchungen werden am Ausbruchmaterial aus der Auffahrung einer neuen Strecke in der sandigen Fazies des Opalinustons im Untertagelabor Mont-Terri und am Gemisch mit Bentonitzusatz in drei Arbeitspaketen durchgeführt:

- AP 1: Ermittlung der geotechnischen Eigenschaften wie z.B. Kompaktion und Permeabilität des Ausbruchmaterials zur langfristigen Abdichtung der Endlagerhohlräume,
- AP 2: Ermittlung der geotechnischen Eigenschaften des kompaktierten Gemisches aus dem Ausbruchtonstein mit Bentonitzusatz zur Prüfung der Eignung für den Verschluss der Strecken und Schächte und
- AP 3: Ermittlung der geotechnischen Eigenschaften des Gemisches aus dem Ausbruchtonstein mit Bentonitzusatz zur Prüfung der Eignung als HAW-Buffermaterial bei hohen Temperaturen in Form von hochverdichteten Formsteinen für Auflager von Abfallbehältern und in Form von Granulat zur Verfüllung des Resthohlraums.
- AP 4: Untersuchung des Gastransportes in geschädigtem Tonstein zur Beteiligung am EU-Projekt EURAD im WP6-GAS

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Das Vorhaben zur Untersuchung der Eignung arteigener Versatz-/Verschlussmaterialien für HAW-Endlager im Tongestein wurde mit einem Abschlussbericht (GRS-703) erfolgreich abgeschlossen. Im Rahmen des Projekts wurden Ausbruchsmaterial aus Opalinuston, MX80-Bentonit und Tonstein/Bentonit-Mischungen als technische Barriere in einem Endlager untersucht und sicherheitsrelevante Eigenschaften der ausgewählten Materialien ermittelt:

- Petrophysikalische Eigenschaften (Mineralien, Kornverteilung, Wassergehalt etc.)
- Wasseraufnahme- und -rückhaltevermögen
- Kompressibilität zur Herstellung von verdichteten Blöcken
- Quelldruck im Verhältnis zur Trockendichte
- Wasserdurchlässigkeit im Verhältnis zur Trockendichte
- Gasmigrationsverhalten unter wassergesättigten Bedingungen
- Thermo-hydro-mechanisches Verhalten.

Generell zeigen die untersuchten Materialien günstige Eigenschaften für die langfristige Isolierung radioaktiver Abfälle im tonigen Wirtsgestein.

Die im Rahmen des EU-Projekts EURAD-WP6-GAS geplanten Laborarbeiten zur Untersuchung des Gastransportes in geschädigtem Tonstein sind abgeschlossen. Die gewonnenen Ergebnisse werden in einem Abschlussbericht zusammengefasst. Ein Entwurf wurde erstellt und wird derzeit für die endgültige Fassung überprüft.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Erstellung des Abschlussberichts EURAD-WP6-GAS

5. Berichte, Veröffentlichungen

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 11668A	
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Smart-Kd in der Langzeitsicherheitsanalyse - Anwendungen (SMILE), Teilprojekt A			
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept des BMWi 2021 - 2025: FuE-Feld C3.1 Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-)Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung; FuE-Feld C3.3 Werkzeuge der Sicherheitsanalysen Relevant für alle Wirtsgesteine			
Laufzeit des Vorhabens: 01.09.2018 bis 31.05.2024		Berichtszeitraum: 01.01.2023 bis 30.06.2023	
Gesamtkosten des Vorhabens: 1.249.122,00 EUR		Projektleiter: Dr. Ulrich Noseck	

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Das Verbundprojekt SMILE (Partner: Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e.V. (HZDR) und Institut für Nukleare Entsorgung des KIT (KIT-INE)) basiert auf den Erkenntnissen der Vorhaben ESTRAL und WEIMAR, in denen das Smart-K_d Konzept für Langzeitsicherheitsanalysen entwickelt, optimiert und in das Rechenprogramm r^{3t} implementiert wurde. In SMILE sollen (i) das bisher entwickelte Konzept um den Einfluss von Redoxreaktionen erweitert, (ii) die chemische Beschreibung durch die Ermittlung der Stöchiometrie, Struktur und thermodynamischer Parameter wichtiger Oberflächenkomplexe weiter untermauert, (iii) unterschiedliche State-of-the-art Oberflächenkomplexmodelle zur Auswertung von vorhandenen experimentellen Daten angewandt, (iv) die Sorptions-Datenbasis durch geeignete Batch- und Säulenexperimente weiter ergänzt und (v) das Konzept durch gezielte Experimente und Modellierung von naturnahen Systemen kritisch überprüft werden. Das hier zu entwickelnde Konzept wird sowohl auf andere Formationen als auch auf andere Codes übertragbar sein und somit auch einen Wissenstransfer zu anderen Forschungsfeldern gestatten.

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

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

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP2: Verzögerung der Arbeiten am Aluminium-Testfall wegen Bugs in der Programmierung des Smart K_d -Moduls in d^{3f++}. Das Debugging dauert derzeit an.

AP3: Abschluss von Experimenten und Darstellung der Daten zur Bestimmung von Selektivitätskoeffizienten von Muskovit für relevante Kationen, Nickel und Europium.

Dokumentation der finalen Modellierungsauswertung zur Oberflächenkomplexierung sowie des reaktiven Stofftransports von Daten aus Batch- und Säulenversuchen in Systemen mit Ni, Quarz und K-Feldspat.

AP5: Weiterführung der großräumigen Strömungs- und Transportrechnungen unter Anwendung des neuen Konzepts. Überprüfung der Ergebnisse hinsichtlich der Einflüsse verschiedener klimatischer Zustände auf die Radionuklidrückhaltung.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP2: Bereinigung des Smart K_d -Moduls von Fehlern, Fertigstellung des Aluminium-Testfalls und der Dokumentation.

AP5: Abschluss und Dokumentation der großräumigen Strömungs- und Transportrechnungen unter Anwendung des neuen Konzepts.

AP6: Finales Projekttreffen mit HZDR und KIT-INE zur Fertigstellung des Projektabschlussberichts.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 11698
Vorhabensbezeichnung: Untersuchung thermisch-hydraulisch-mechanisch-chemischer Einwirkungen auf zementbasierte Dichtelemente (THyMeCZ)		
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Im Projektförderprogramm des BMWi – Forschungsförderung zur nuklearen Sicherheit (2021-2025) – ist das Vorhaben dem FuE-Feld C3.1 „Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-)Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung“, FuE Thema „Weiterentwicklung des Verständnisses zu den im Endlagersystem und der Biosphäre ablaufenden thermischen, hydraulischen, mechanischen, chemischen und biologischen (THMCb-)Prozessen und ihrer Kopplung“ zuzuordnen.		
Laufzeit des Vorhabens: 01.09.2018 bis 31.05.2024	Berichtszeitraum: 01.01.2023 bis 30.06.2023	
Gesamtkosten des Vorhabens: 2.558.457,16 EUR	Projektleiter: Dr. Thorsten Meyer	

1 Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

2 Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP 1: Bereitstellung von Material und Methoden
 AP 2: HC-Versuche
 AP 3: HMC-Versuche
 AP 4: THC-Versuche
 AP 5: TM-Versuche
 AP 6: THMC-Versuche
 AP 7: Modelltheoretische Untersuchungen
 AP 8: Dokumentation
 AP 9: Analyse von Salzprüfkörpern aus der WIPP
 AP 10: Langzeitkorrosionsexperimente
 AP 11: MAGIC

3 Durchgeführte Arbeiten

AP 1 – Bereitstellung von Material und Methoden

In diesem Arbeitspaket erfolgt die Zusammenstellung bzw. Entwicklung geeigneter Untersuchungsmethoden basierend auf vorlaufenden FuE-Vorhaben. Die Treffen des Arbeitskreises Betonkorrosion (AKB) wurden verstärkt im letzten Halbjahr wieder

aufgenommen, so dass die Vorbereitungen des Workshops „Zementbasierte Verschlussbauwerke im Salinar“ planmäßig voranschreiten.

AP 2 – HC-Versuche

Die im AP 2 vorgesehenen Versuche wurden bereits erfolgreich abgeschlossen.

AP 3 – HMC-Versuche

Die im AP 3 vorgesehenen Versuche wurden bereits erfolgreich abgeschlossen.

AP 4 – THC-Versuche

Die im AP 4 vorgesehenen Versuche wurden bereits erfolgreich abgeschlossen.

AP 5 – TM-Versuche

Die im AP 5 vorgesehenen Versuche wurden bereits erfolgreich abgeschlossen.

AP 6 – THMC-Versuche

Zurzeit befinden sich eine kombinierte A1- und eine kombinierte M2-Probe in den beiden Versuchsständen. Nach Erhalt der US-Proben wird die M2-Probe ausgebaut und durch eine kombinierte US-Probe ersetzt.

AP 7 – Modelltheoretische Untersuchungen

Die Modellrechnungen haben bereits begonnen und werden im 2. HJ 2023 parallel zur Auswertung der LZ-Korrosionsversuche (s. AP 10) abgeschlossen sein. Z.Z. erfolgt die Abstimmung zur Zusammensetzung der Baustoffe sowie die Zusammenstellung der Datenbasis aus THEREDA

AP 8 – Dokumentation

Erstellung der Dokumente zur Qualitätssicherung der Arbeiten im Projekt sowie die Erstellung des HJB und JB.

AP 9 – Untersuchung der Salzkörper aus der WIPP

SNL stellt z.Z. kombinierte Probekörper her und wird diese der GRS im zweiten HJ 2023 zur Verfügung stellen. Erste hydraulische-mechanische Untersuchungen zum verwendeten US-Sorelbeton wurden bereits durchgeführt.

AP 10 – Langzeitkorrosionsversuche

Die Beendigung der Langzeitkorrosionsexperimente hat sich verzögert, da mehr Kaskaden durchgeführt werden können als ursprünglich angenommen. Im September 2023 wird die letzte Kaskade beendet sein. Bei den HC/THC-Versuchen, die in die Langzeitkorrosionsversuche überführt worden waren, werden die letzten Lösungsanalysen durchgeführt. Danach werden alle Proben in eine definierte Langzeitlagerung überführt, damit sie in einem späteren Projekt Verwendung finden können.

AP 11 – MAGIC

In dem Berichtszeitraum wurden zylindrische Prüfkörper aus dem Niedrig-pH-Beton S5 hergestellt. Es zeigte sich jedoch, dass die Konfiguration mit Doppelgummimantel ausgestatteten Prüfkörper in Abwesenheit eines Manteldruckes zu Umläufigkeiten führte und damit zur sofortigen Beendigung der Advektionsversuche mit diesem Versuchsaufbau. Es ist nun die simultane experimentelle Analyse von mehreren Prüfkörpern unter chemisch-hydraulisch-mechanisch gekoppelten Randbedingungen in zwei anderen Prüfständen geplant. Z.Z werden beide Prüfstände für diese Experimentbedingungen Instand gesetzt.

4 Geplante Weiterarbeiten

Im folgenden HJ werden die Messungen an dem THMC-Messstand an den vorgesehenen Systemen fortgeführt. Mit der Untersuchung der US-Proben wird nach deren Erhalt begonnen. Die Langzeitkorrosionsexperimente werden im nächsten HJ abgeschlossen sein.

5 Berichte, Veröffentlichungen

-

Auftragnehmer: Karlsruher Institut für Technologie (KIT) - Kompetenzzentrum für Materialfeuchte, 76128 Karlsruhe		Förderkennzeichen: 02 E 11799A
Vorhabenbezeichnung: Vertikales hydraulisches Dichtsystem nach dem Sandwich-Prinzip – Hauptprojekt. Kurztitel: Sandwich-HP		
Zuordnung zum FuE-Programm: C2.2 Endlagertechnik C2.3 Geotechnische und technische Barrieren, C2.4 Monitoring		
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2019 bis 30.06.2023	Berichtszeitraum: 01.01.2023 bis 30.06.2023	
Gesamtkosten des Vorhabens: 3.264.630,82 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Katja Emmerich	

1. Vorhabenziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

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

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP2: Siehe Projektstatusbericht der GRS zu 02 E 11799B.

AP4: Die Installation des Schacht 2 wurde mit dem Einbau des mechanischen Widerlagers und der Installation des Hydrationsystems abgeschlossen. Die Instrumentierung wurde mit Test- bzw. Nullmessungen vor Beginn der Aufsättigung sowie dem Anschluss aller Sensoren an die Datenerfassungssysteme bis Ende Mai abgeschlossen.

AP5: Siehe Projektstatusbericht der GRS zu 02 E 11799B.

AP6: Die mineralogische Charakterisierung des Secursol MHP1(70/30) sowie des Calcigels für Schacht 2 wurde abgeschlossen. Die rückgebauten Proben des HTV-8 wurden hinsichtlich des Kationenaustauschs in den DS sowie des Ionentransports durch das Sandwichsystem analysiert. Die Beaufschlagung des HTV-9 mit der Materialfolge wie im Schacht 2 mit Pearson Water A3 wurde begonnen (siehe Projektstatusbericht TUBAF zu 02 E 11799C). Die MiniSandwich Versuche Oe13 und Oe14 wurden fortgesetzt nachdem der Durchbruch nach 341 bzw. 463 d beobachtet wurde. Versuchsdauer derzeit > 800 d. Die Versuche Oe15-Oe18 wurden eingebaut. Die Versuche sind Wiederholungsversuche zur Bestimmung der Durchbruchzeiten. Es wurde eine neue Serie Quelldruckmessungen mit Calcigel (Schacht 1), Lufttrocken, mit Pearson Wasser A3 zur Parametrisierung gestartet. Die Kalibration der Zellen hinsichtlich Tot- und Probenvolumen wurde vor dem Einbau verifiziert.

AP7: Siehe Projektstatusbericht des GRS zu 02 E 11799B.

AP8: siehe Abschnitt 5 und Projektstatusbericht GRS und TUBAF zu 02 E 11799B/C

4. Geplante Weiterarbeiten

Das Projekt Sandwich-HP endet zum 30.06.2023 und wird als Sandwich-HP2 weitergeführt.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Emmerich, K et al. (2023) The Sandwich seal systems: A large-scale shaft sealing experiment at the Mont Terri rock laboratory – Installation and materials. EGU General Assembly 2023 – Vienna, Austria, 23-28 April 2023.

Bakker, E. et al. (2023) Impact of seal configuration and pore fluid type on ion transport and cation exchange in bentonite in semi-technical scale Sandwich sealing experiments. EGU General Assembly 2023 – Vienna, Austria, 23-28 April 2023.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 11799B	
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Vertikales hydraulisches Dichtsystem nach dem Sandwich-Prinzip - Hauptprojekt (SANDWICH-HP), Teilprojekt B			
Zuordnung zum FuE-Programm: C2.2 Endlagertechnik C2.3 Geotechnische und technische Barrieren, C2.4 Monitoring			
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2019 bis 30.06.2023		Berichtszeitraum: 01.01.2023 bis 30.06.2023	
Gesamtkosten des Vorhabens: 1.453.730,00 EUR		Projektleiter: Dipl.-Geophys. K. Wieczorek	

1.Vorhabenziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

Das von KIT entwickelte Sandwich-System besteht aus Wechsellagen von Bentonit-Dichtsegmenten (DS) und hydraulisch leitenden Potentialausgleichsschichten (Äquipotenzialsegmente – ES). Im Sandwich-HP werden solche Dichtsysteme in zwei vertikalen Experimentalschächten von 1.18 m Durchmesser und knapp 12 m bzw. 10 m Tiefe eingebaut. Die Dichtsysteme werden über Druckkammern im Schachttiefsten mit synthetischem Opalinuston-Porenwasser aufgesättigt, das jeweils über geneigte Zuleitungsbohrlöcher zugeführt wird. Die Schächte und das umgebende Gebirge werden zur Überwachung des Gesamtsystems intensiv instrumentiert. Die Versuchsziele umfassen die Demonstration der Einbautechnik, die Untersuchung des Aufsättigungsprozesses, die Qualifizierung der Mess- und Überwachungstechnik sowie die Bewertung der Wirksamkeit des Sandwich-Verschlussystems.

2.Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

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

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP2: Die allmähliche Aufsättigung des Dichtsystems in Schacht 1 (siehe AP5) führt zu einer Reaktion des Porendrucks und der Spannungssensoren im Nahbereich von Schacht 1 auf der Höhe des untersten Dichtelements. Der Porendruck ist bisher um ca. 0.5-0.6 MPa angestiegen, die Radialspannung (bezogen auf Schacht 1) um bis zu 1 MPa. Ebenso wie die Spannungssensoren im Schacht (AP5) reagieren die Sensoren im Gebirge auf Änderungen des Flüssigkeitsdrucks im unteren Äquipotentialsegment ES1. Im Februar 2023 wurden zwei weitere Minipiezometer im Opalinuston nahe Schacht 2 installiert. Die Gebirgsinstrumentierung ist damit abgeschlossen.

AP4: Die Installation und Instrumentierung von Schacht 2 wurde abgeschlossen (siehe Projektstatusbericht des KIT zu 02 E 11799A).

AP5: Im Berichtszeitraum wurde die Aufsättigung des Dichtsystems in Schacht 1 planmäßig fortgesetzt. Zwischen Ende März und Ende Mai kam es zu kurzzeitigen Abfällen des Flüssigkeitsdrucks in Zusammenhang mit Arbeiten am Hydratationssystem, auf die die Spannungssensoren im Dichtsystem sehr empfindlich reagierten. Seither läuft die Aufsättigung wieder gleichmäßig mit einer Rate von 0.5 l/d. Der Druck in ES1 beträgt 1.5 MPa. Mittels TDR-, relativer Feuchte- und Porenwasserdruckmessungen ist nachzuweisen, dass das untere Dichtsegment signifikant aufgesättigt wurde. Radiale Spannungsmessungen zeigen Werte zwischen 1.7 und 2.5 MPa beim unteren Dichtsegment. Die übrigen Dichtsegmente zeigen eine geringe allmähliche Spannungserhöhung und Erhöhung der relativen Feuchte, die auf eine langsame Aufsättigung über das Gebirge zurückzuführen sind. Bei Schacht 2 wurde am 30. Mai die Druckkammer geflutet und mit der Aufsättigung von unten begonnen, bisher nur durch Druck der Wassersäule zwischen Vorratsgefäß und Druckkammer.

AP6: Siehe Projektstatusbericht des KIT zu 02 E 11799A.

AP7: Nach Kalibrierung des Bentonitstoffmodells wurde die Abteufung von Schacht 1 und die Aufsättigung des Dichtsystems mit einem axialsymmetrischen Modell wiederholt, in diesem Fall mit einer realistischen Aufsättigungsgeschichte, die auch den Bypass des unteren Dichtsegments im August 2021 miteinbezog. Ein Vergleich der Ergebnisse mit den Messungen im Schacht zeigt, dass die wesentlichen Vorgänge gut reproduziert werden, allerdings sind Aufsättigung und Quelldruckentwicklung etwas zu langsam, so dass eine weitere Kalibrierung von Parametern (insbesondere der Porositäts-Permeabilitäts-Beziehung) nötig ist.

AP8: Siehe Abschnitt 5.

4. Geplante Weiterarbeiten

Das Projekt Sandwich-HP endet zum 30.06.2023 und wird als Sandwich-HP2 weitergeführt.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Wieczorek, K. et al. (2023). SW-A Experiment: Sandwich-HP: Vertical Hydraulic Sandwich Sealing System – First Sensor Data Report, Technical Note TN2020-21, Mont Terri Project, March 2023.

Wieczorek, K. et al. (2023). The Sandwich Seal Systems: A large-scale shaft sealing experiment at the Mont Terri rock laboratory – hydration and monitoring. EGU General Assembly 2023 – Vienna, Austria, 23-28 April 2023.

Siehe auch Projektstatusbericht von KIT und TUBAF zu 02 E 11799A/C

Auftragnehmer: Technische Universität Bergakademie Freiberg, Akademiestr. 6, 09599 Freiberg		Förderkennzeichen: 02 E 11799C
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Vertikales hydraulisches Dichtsystem nach dem Sandwich-Prinzip - Hauptprojekt (SANDWICH-HP), Teilprojekt C		
Zuordnung zum FuE-Programm: C2.2 Endlagertechnik C2.3 Geotechnische und technische Barrieren, C2.4 Monitoring		
Laufzeit des Vorhabens: 01.09.2020 bis 30.06.2023	Berichtszeitraum: 01.01.2023 bis 30.06.2023	
Gesamtkosten des Vorhabens: 199.115,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Thomas Nagel	

1. Vorhabenziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

Das von KIT entwickelte Sandwich-System besteht aus Wechsellagen von Bentonit-Dichtsegmenten (DS) und hydraulisch leitenden Potentialausgleichsschichten (Äquipotenzialsegmente – ES). Im Sandwich-HP werden solche Dichtsysteme in zwei vertikalen Experimentalschächten von 1.18 m Durchmesser und knapp 12 m bzw. 10 m Tiefe eingebaut. Die Dichtsysteme werden über Druckkammern im Schachttiefsten mit synthetischem Opalinuston-Porenwasser aufgesättigt, das jeweils über geneigte Zuleitungsbohrlöcher zugeführt wird. Die Schächte und das umgebende Gebirge werden zur Überwachung des Gesamtsystems intensiv instrumentiert. Die Versuchsziele umfassen die Demonstration der Einbautechnik, die Untersuchung des Aufsättigungsprozesses, die Qualifizierung der Mess- und Überwachungstechnik sowie die Bewertung der Wirksamkeit des Sandwich-Verschlussystems.

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

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

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP6: An der TUBAF wird aktuell der 9. Halbtechnische Versuch (HTV9) als Vergleich zum in-situ Versuch im Schacht 2 in einer Stahlzelle mit 80 cm Durchmesser durchgeführt. Der HTV9 ist nach dem Sandwichprinzip aus 4 Dichtsegmenten (DS) je 25 cm Schichtstärke unterbrochen von 15 cm dicken Äquipotenzialsegmenten (ES) aus Feinsand N45 aufgebaut. Der Einbau der Schichten erfolgte vom 30.11.2022 – 02.02.2023. Der Bentonit wurde beim Einbau beprobt. Die Einbaumassen und Wassergehalte von Sand und der beiden Bentonite wurden erfasst und die Lage der Segmente gemessen. Aus den Werten konnten die Einbaudichten ermittelt werden. Die Trockendichten der beiden unteren DS aus Secursol MHP1 (70/30) liegen bei 1,55 g/cm³, die der oberen beiden DS aus Calcigel bei 1,70 g/cm³. In den einzelnen Segmenten sind 6 Flächendruckgeber eingebaut, 3 davon messen in axialer Richtung, und weitere 3 in radialer Richtung. Weiterhin wurde der Versuch mit 3 TDR-Sensoren ausgestattet, um die Flüssigkeitsinfiltration in vertikaler Richtung durch das Sandwich zu beobachten. Zusätzlich wird die Flüssigkeitsausbreitung in den unteren beiden Sandsegmenten ES1 und ES2 mit horizontal eingebauten TDR-Sensoren überwacht. Außerdem werden die Porenüberdrücke der Sandsegmente ES1, ES2 und ES3 erfasst.

Der Versuch wird seit dem 09.02.2023 mit Pearson-Water vom Typ A3 von unten aus einem Schotterwiderlager über eine Pumpanlage druckbeaufschlagt. Nach Auffüllen des Schotterwiderlagers mit der Flüssigkeit wurde der Flüssigkeitsdruck über 40 Tage in mehreren kleinen Stufen bis auf 0,5 MPa erhöht. Der axial messende Druckgeber auf der Oberseite des untersten Dichtsegmentes (DS1) zeigte anfangs den größten Druckanstieg. Später stieg auch der Druck in radialer Richtung in DS1 stark an und überschritt die an den anderen Positionen gemessenen Drücke deutlich, was klar die Quellwirkung des Bentonits in DS1 anzeigt. Etwa 20 Tage nach der Flüssigkeitsdruckerhöhung auf 1 MPa am 21.03. begann auch der radiale Druck im darüberliegenden Dichtsegment (DS2) anzusteigen. Daraus kann geschlussfolgert werden, dass der Quellprozess auch in mittlerer Höhe von DS2 eingesetzt hat. Allerdings sind die Prozesse langsamer als im DS1, was aus dem weniger starken Anstieg der Kurve hervorgeht. Die Porenüberdrücke in den Sandsegmenten blieben bis Ende Mai alle auf Null-Niveau. Seit dem 02.06. steigt der Porenüberdruck im unteren Sandsegment (ES1), woraus geschlussfolgert werden kann, dass von unten über DS1 mehr Flüssigkeit dem Sandsegment zugeführt wird als aus dem Sandsegment nach oben in DS2 abgegeben wird. Der Volumenstrom in die Zelle liegt Ende Juni bei ca. 15 ml/h mit abfallender Tendenz. Der Fluidruck wird noch bei 1 MPa gehalten.

AP8: Siehe Abschnitt 5.

4. Geplante Weiterarbeiten

Das Projekt Sandwich-HP endet zum 30.06.2023, wobei der HTV-9 bis zu seinem Abschluss fortgeführt werden soll. Das Versuchsregime beim HTV9 erfolgt in ständiger Absprache mit dem KIT. Vor einer erneuten Fluidrunderhöhung wird abgewartet, wie sich die Drücke im Sandwich entwickeln, insbesondere in der ES1.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Wieczorek, K. et al. (2023). SW-A Experiment: Sandwich-HP: Vertical Hydraulic Sandwich Sealing System – First Sensor Data Report, Technical Note TN2020-21, Mont Terri Project, March 2023.

Wieczorek, K. et al. (2023). The Sandwich Seal Systems: A large-scale shaft sealing experiment at the Mont Terri rock laboratory – hydration and monitoring. EGU General Assembly 2023 – Vienna, Austria, 23-28 April 2023.

Siehe auch Projektstatusbericht von KIT und GRS zu 02 E 11799A/B

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 11819
Vorhabensbezeichnung: Mineralumwandlung und Sorption bei erhöhten Temperaturen in geklüfteten Kristallingesteinen und Barrierematerial (MUSE)		
Zuordnung zum FuE-Programm: FuE-Feld C1.3 Methodische Grundlagen eines Standortvergleichs, FuE-Feld C2.3 Geotechnische und technische Barrieren, Punkt 2, 4 FuE-Feld C3.1 Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-)Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung, Punkt 1		
Laufzeit des Vorhabens: 01.08.2019 bis 31.03.2024	Berichtszeitraum: 01.01.2023 bis 30.06.2023	
Gesamtkosten des Vorhabens: 1.930.070,84 EUR	Projektleiterin: Dr. Artur Meleshyn	

1. Vorhabenziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

Bei der Durchführung des Vorhabens werden folgende Arbeitspakete bearbeitet:

AP 1: Übertragbarkeit der normierten Verteilungskoeffizienten zwischen verschiedenen Kristallin-Standorten

AP 2: Einfluss von erhöhten Temperaturen auf die Stabilität von Kluffüllungen

AP 3: Einfluss von erhöhten Temperaturen auf die Stabilität von Bentoniten

AP 4: Dokumentation und Projektleitung

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP 1: Übertragbarkeit der normierten Verteilungskoeffizienten:

Die Auslaugungsbatches, die Extraktionen mit 0,1 M HCl, 6M HCl und dem Königswasser sowie die Totalaufschlüsse mit der Tetrafluoroborsäure (HBF₄) sowie die dazugehörigen ICP-MS-Messungen wurden für alle 10 Proben abgeschlossen. Die BET-Messungen wurden für 3 Proben abgeschlossen.

AP 2: Einfluss von erhöhten Temperaturen auf die Stabilität von Kluffüllungen:

Die Charakterisierung der tschechischen und südkoreanischen Kernproben wurden an der TU Darmstadt abgeschlossen.

AP 3: Einfluss von erhöhten Temperaturen auf die Stabilität von Bentoniten:

Die Versuchsreihe aus 30 Versuchen bei 120°C mit den vom IGEM RAN an die GRS übergebenen vier Bentoniten wurde beendet.

AP 4: Dokumentation und Projektleitung:

Kommunikation mit der TU Darmstadt als Unterauftragnehmer.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP 1: Abschluss der BET-Messungen für die restlichen 7 Proben. Auswertung der ICP-MS- und BET-Messungen.

AP 2: Keine weiteren Arbeiten.

AP 3: Abschluss der Gasanalysen. Auswertung der Ergebnisse.

AP 4: Keine weiteren Arbeiten.

5. Berichte, Veröffentlichungen

- keine -

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 11829
Vorhabensbezeichnung: Tonforschung im Felslabor Mont Terri ab Phase 25 (MonTe-25)		
Zuordnung zum FuE-Programm: FuE-Bereich 2, FuE-Feld 2.2 Charakterisierung des Geosystems, Relevant für das Wirtsgestein Ton		
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2019 bis 30.06.2023	Berichtszeitraum: 01.01.2023 bis 30.06.2023	
Gesamtkosten des Vorhabens: 1.529.410,00 EUR	Projektleiter: Dr.-Ing. Oliver Czaikowski	

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Als Partner im Betreiber-Konsortium führt die GRS seit 1999 im Auftrag des BMWi Forschungsarbeiten im schweizerischen Untertagelabor Mont Terri im Opalinuston durch. Die Fortführung der Arbeiten zur Tonforschung in Mont Terri in den kommenden Phasen dient

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

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

- AP1: FE Experiment – Porendruckmessungen und Modellrechnungen als Beitrag zum Streckenlagerungsexperiment der NAGRA im 1:1 Maßstab
- AP2: HE-E Experiment – Weiterführung des im Rahmen des EU-Projekts PEBS aufgebauten Erhitzerversuchs im Mikrotunnel (mit NAGRA, ENRESA, BGR, Obayashi)
- AP3: DM-A Experiment – Langzeitverformungsmessung des Tonsteins in einem Bohrloch
- AP4: Keine Fortführung der Arbeiten zum SB-A Experiment
- AP5: Keine Fortführung der Arbeiten zum DB Experiment
- AP6: Auslagerung weiterführender Arbeiten zum LT-A Experiment in einer eigenen Vorhabenskizze
- AP7: Weiterentwicklung von VIRTUS für den Einsatz im Tonstein
- AP8: Mine-By Experiment (MB-A) in der sandigen Fazies (mit BGR und Swisstopo)
- AP9: CD-A Experiment in der sandigen Fazies (Konsortialführer BGR)
- AP10: Technical und Steering Meetings

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1: Die GRS beteiligt sich in der aktuellen Phase des internationalen Projekts DECOVALEX an der Modellierung des FE-Experiments. Hierfür wird der FEM Code CODE_BRIGHT verwendet. Im Berichtszeitraum wurde die Kalibration des 3-dimensionalen Modells an die Messwerte beendet. Im nächsten Schritt erweiterte die GRS das Modell um den Spritzbeton und die Ventilationsphase. Mit Einbindung der Ventilation des FE-Tunnels konnte die Porendruckverteilung im Opalinuston stark verbessert werden.

AP2: Von den Experimentpartnern wurde im Vorjahr die weitere Vorgehensweise mit Abkühlung und Rückbau festgelegt. So sollte im 1.Hj. 2023 die Anbohrung der beiden Abschnitte mit Kernentnahme erfolgen, um die aktuellen Sättigungszustände und Dichten vor der Abkühlungsphase festzustellen. Ein erster Prototyp der speziell für die Kernentnahme von teilgesättigten Verschlussbaustoffen entwickelte Entnahmetechnik wurde auf dem TM-40 gezeigt. Zum Ende des 1. HJ. 2023 konnten die organisatorischen Vorarbeiten (Budgetfixierung und -aufteilung auf die Partner, Freigabe der Bohrarbeiten durch das Steering Committee und die Kantonsregierung, Vergabe der Bohrarbeiten, Festlegung der Bohransatzpunkte und-winkel) abgeschlossen werden, so dass die Aufnahme der Bohrvorarbeiten zur 37.KW geplant ist.

AP3: Die Messungen wurden fortgeführt, die Messwerte zeigen eine deutliche Reaktion auf die Streckenerweiterung durch Zunahme der Porendrücke und Temperaturwerte. Daher wurde der Kontakt zum RI-Experiment (Response Investigation, PI Nagra) im vergangenen Jahr hergestellt. Nach der Diskussion mit den Projektpartnern am Rande des TM-40 im Januar 2023 wurde festgelegt, dass das DM-A Experiment relevante Messdaten zur Verfügung stellen wird.

AP9: Im CD-A Experiment wird der Einfluss der Bewetterung auf das hydraulisch-mechanische Verhalten des Opalinustons durch Vergleich der Umgebung einer bewetterten und einer abgeschlossenen Nische überwacht, wobei GRS die Porendruckmessungen im Gebirge übernimmt. Unterschiede im Porendruck können auf die unterschiedliche Nischenbewetterung zurückgeführt werden (stärkere Absenkung des Porendrucks im Bereich der offenen Nische, aufgrund der stärkeren Bewetterung über Tunnel und Nische als im Bereich der geschlossenen Nische). Neben den Porendruckmessungen beteiligt sich die GRS an den Modellierungsarbeiten. Gemeinsam mit den Kollegen der BGR wurde eine Modellierungsstrategie ausgearbeitet, um eine Vergleichbarkeit der Ergebnisse zu ermöglichen. Dazu sollen je 2 weitere Minipiezometer in die Ortsbrust der offenen bzw. der geschlossenen Nische eingebracht werden. Im 1. Hj. 2023 wurde aufgrund des beengten Raumes in den Nischen zunächst die Realisierbarkeit (auf dem Papier und vor Ort) überprüft. Die Instrumentierung weiterer Minipiezometer wurde als umsetzbar eingestuft. Die Instrumentierung soll im 1.Hj 2024 stattfinden. Eine Instrumentierung im 2. Hj. 2023, wie zunächst vorgesehen, ist aufgrund einer kurzfristigen Verschiebung der Probennahme für MAGNUS (FKZ 02E12032) nicht umsetzbar.

AP10: Teilnahme am Technical Meeting in der 4.KW sowie an den Steering Meetings in der in der 12. und 19.KW

4. Geplante Weiterarbeiten

- Weiterführung der Messungen in den laufenden Experimenten
- Durchführung begleitender Modellierungen zu den laufenden Experimenten
- Teilnahme an den Steering Meetings im 2.Hj.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Posterbeiträge auf dem Technical Meeting TM-40 im Januar 2023

Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer: BGE TECHNOLOGY GmbH		Förderkennzeichen: 02 E 11839
Vorhabensbezeichnung Entwicklung eines Leitfadens zur Auslegung und zum Nachweis von geotechnischen Barrieren für ein HAW Endlager in Salzformationen (RANGERS)		
Zuordnung zum FuE-Programm: FuE-Feld 3.3 Geotechnische Barriere		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2019 bis 31.12.2023	Berichtszeitraum: 01.01.2023 bis 30.06.2023	
Gesamtkosten des Vorhabens: 519.774,27 EUR	Projektleiter: Eric Simo	

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Geotechnische Barrieren für ein Endlager in Salzformationen wurden schon im Rahmen zahlreicher Forschungsprojekte behandelt. Im Rahmen der vorläufigen Sicherheitsanalyse für den Standort Gorleben (VSG) wurde ein Nachweisverfahren für die Integrität von Verschlusselementen in einem HAW Endlager in steil-lagernden Salzformationen entwickelt. Im Projekt ELSA wurden Schachtverschlüsse für HAW-Endlager ausführlich behandelt. Erste Empfehlungen zur Planung und Ausführung von geotechnischen Barrieren wurden vom Arbeitskreis Salzmechanik der DGGT formuliert. Die BGE und BGE TECHNOLOGY entwickeln und bauen seit über zehn Jahren Strömungsbarrieren im Endlager Asse. Mittlerweile wurden 32 Strömungsbarrieren im Routinebetrieb gebaut. Ein Prototypabdichtbauwerk wurde von der BGE im realen Maßstab im Endlager Morsleben gebaut und wird gerade wissenschaftlich untersucht. Trotz umfangreichem Wissen und Erfahrung über geotechnischen Barrieren in Salzformationen, fehlt es an Regelwerken für eine qualitätsgesicherte Auslegung solcher Bauwerke für ein HAW-Endlager. In Kollaboration mit SANDIA National Laboratories setzt sich BGE TECHNOLOGY im Vorhaben RANGERS zum Ziel, einen Leitfaden zu entwickeln, in dem das vorhandene Wissen und die gesammelte Erfahrung über geotechnische Barrieren im Salz in Deutschland und in den USA einfließen. Empfehlungen zur Auslegung und Nachweis von geotechnischen Barrieren basierend auf den Stand der Wissenschaft und Technik sind zu formulieren und ein Überblick über neuartige Konzepte, Baustoffe und Technologien, die den Stand der Technik von Morgen prägen werden, wird gegeben.

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

- AP 0: Organisation der Zusammenarbeit zwischen BGE TEC und SANDIA – Literaturrecherche zu geotechnischen Bauwerken im Salz
- AP 1: Zusammenstellung des Stands der Wissenschaft und Technik bei der Planung und Bau von geotechnischen Barrieren für Endlager im Salz
- AP 2: Herleitung und Zusammenstellung der Randbedingungen und Anforderungen
- AP 3: Entwicklung des Leitfadens zur Auslegung und zum Nachweis von geotechnischen Barrieren für ein HAW-Endlager in Salzformationen
- AP 4: Nutzung des Leitfadens für die Auslegung und den Nachweis von geotechnischen Barrieren für ein der im FuE-Vorhaben KOSINA entwickelten generischen Endlagerkonzepte.
- AP 5: Bewertung der Ergebnisse und Vergleich mit Erkenntnissen aus früheren Projekten
- AP 6: Dokumentation und Abschlussbericht

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP 4: Im Berichtszeitraum wurden die Arbeiten zur Integrität des Schachtverschlusses intensiviert. Für die Berechnungen wurde ein Endlagergroßes Modell mit hohem Detaillierungsgrad im Bereich der Verschlusskomponente zugrunde gelegt. Die ersten Berechnungen, die bis lang in den früheren Versionen der Berechnungscode FLAC3D durchgeführt wurden, wurden in der im Frühling 23 erschienenen Version 9 von FLAC3D wiederholt. Mit dieser neuen Version konnte die numerische Behandlung der mechanischen Wechselwirkungen zwischen dem Salzgebirge, der Kontaktzone und den Komponenten im Schacht durch den Einsatz von Interface-Elementen verbessert werden. Mit FLAC3D 9 konnte auch die Berechnungsgeschwindigkeit erheblich verbessert werden. Damit ist es möglich die Entwicklung des Schachtverschlusses bis zum Ende der thermischen Phase der Endlagerentwicklung bis Ende der Projektlaufzeit zu analysieren. Weitere Testberechnungen befassten sich mit der Wahl der richtigen Stoffmodelle für die Verschlusskomponenten und die Parametrisierung der Eigenschaften der Kontaktzone. Dieser Schritt ist insofern nötig, da viele Materialien im Schacht wie Salzgrus-Ton-Gemisch bislang wenig numerisch untersucht wurden. Das rheologische Verhalten von Bitumenverfüllten Schottersäulen steht noch nicht in Materialmodellen zur Verfügung. Dennoch konnte der aktuelle Stand zum Materialverhalten von Sorelbeton aus laufenden Forschungsprojekten berücksichtigt werden. Nach Fertigstellung der Testrechnungen und der Kalibrierungsphase werden die finalen Berechnungen gestartet, die bis zum Projektende andauern werden.

Analog zum Schachtverschluss und basierend auf die Erfahrungen, die in der Bearbeitung der Integrität des Schachtverschlusses gewonnen wurden, wurden die Arbeiten für den numerischen Integritätsnachweis der Streckenverschlüsse aufgenommen. Es wurde unterschiedliche Modelle entwickelt mit unterschiedlichen Detaillierungsgraden der Verschlusskomponente entwickelt. Gegenwärtig findet der Test Modelle im Hinblick auf eine ausreichenden Diskretisierung und numerischen Effizienz getestet. Der Aufbau der Berechnungsroutine wird zurzeit entwickelt.

Zusammen mit dem Projektpartner SANDIA wurden ein Endlagermodell mit knapp 23 Mio. Elementen entwickelt, die für den Performance Assessment des ganzen Endlagersystems zugrunde gelegt werden soll. Das Modell wurden anschließend von SANDIA im Hinblick auf die Verwendung in dem PA-Code PFLOTRAN weiterverarbeitet. Es wurden erste Testberechnungen auf einem Rechencluster in den USA zur Prüfung der Rechenfähigkeit durchgeführt. Der Test war erfolgreich. In dem Modell soll nun der Transport von Gasen und Laugen unter Berücksichtigung von Non-Darcy-Fluidtransport im Salzkörper und impliziter Kopplung mit Kompaktionsberechnungen von BGE TEC analysiert werden. Dabei soll der Einfluss der geotechnischen Barrieren auf die hydraulische Entwicklung des Gesamtsystems gezeigt werden.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP 4: Abschluss der Arbeiten zur Integrität der geotechnischen Barrieren und Durchführung der hydraulischen Sicherheitsuntersuchungen beim Projektpartner SANDIA. Abschluss des Projekts und Fertigstellung der Berichte.

5. Berichte, Veröffentlichungen

US/German-Workshop 23: RANGERS: Integrity of shaft seals (Präsentation)

US/German-Workshop 23: RANGERS - Summary of State-of-the-Art in EBS materials (Präsentation)

Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer: Johannes Gutenberg-Universität Mainz, Saarstr. 21, 55122 Mainz		Förderkennzeichen: 02 E 11860A
Vorhabensbezeichnung: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen – Phase II (GRaZ II), Teilprojekt A		
Zuordnung zum FuE-Programm: Fortentwicklung der Instrumente und Methodik für den Sicherheitsnachweis („Safety Case“) und vertiefte Untersuchungen zu Systemverhalten und -entwicklung sowie zu technischer Machbarkeit und Langzeitverhalten von Endlagerkomponenten		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2020 bis 30.09.2023	Berichtszeitraum: 01.01.2023 bis 30.06.2023	
Gesamtkosten des Vorhabens: 571.271,00 EUR	Projektleiter: Prof. Reich	

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

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

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Um den Einfluss von Fe(II) auf die Sorption von Pu(IV) an Zementphasen unter definierten Redoxbedingungen untersuchen zu können, musste das Verhalten der elektrochemischen Zelle (ECZ) hinsichtlich der Stabilisierung von Fe(II) weiter untersucht werden. In vorherigen Experimenten war beobachtet worden, dass bis zu 92 % des eingesetzten Fe(II) an der Carbonglas-Arbeits Elektrode der ECZ sorbiert wurde. In dem neuen Experiment wurde eine 1×10^{-8} M $^{55/56}\text{Fe}$ -Lösung bei pH 10,1 in der ECZ elektrolysiert, welche mit einer zusätzlichen, nicht an den Stromkreis angeschlossenen baugleichen Carbonglas-Elektrode ausgestattet war. Nach drei Tagen Elektrolyse wurde Fe von den Elektroden mit HCl desorbiert und mittels LSC quantifiziert. An der Carbonglas-Arbeits Elektrode wurde mehr als doppelt so viel ^{55}Fe -Aktivität gemessen als an der nicht angeschlossenen Vergleichselektrode (36 % vs. 14 %). In Zukunft soll versucht werden, die Fe-Sorption an der Elektrode des ECZ weiter zu verringern. Vor den Studien zum Einflusses von Fe(II) auf die Sorption von Pu(IV) an Calcium-Silicat-Hydrat (C-S-H) wurden die jeweiligen Chemikalien auf Fe-Verunreinigungen untersucht. Insbesondere wurde C-S-H (Ca:Si 0,8, 10 g/L) mit CaO (> 99,95 % Reinheit) in MilliQ-Wasser synthetisiert. Die C-S-H-Mutterlauge wurde mittels ICP-MS mit Kollisionszelle (He) bezüglich des Fe-Gehalts analysiert. Dabei konnte gezeigt werden, dass gegenüber früheren Analysen der Fe-Untergrund der zum Ansäuern der Proben verwendeten destillierten HNO_3 etwa 20-mal niedriger war und der Fe-Gehalt der C-S-H-Mutterlauge gegenüber diesem Untergrund (BCE 500 ppt) nicht erhöht war. Damit kann bei den geplanten Sorptionsexperimenten mit Pu und C-S-H-Phasen von einem geringen Fe-Untergrund ausgegangen werden.

Mit diesen verbesserten Ausgangsbedingungen wurde die Kinetik der Sorption von 1×10^{-8} M Pu(IV) an C-S-H (Ca:Si 0,8; S/L 5,5 g/L) in VGL-C (C-S-H-Porenwasser basierend auf der verdünnten Gipshutlösung (VGL)) bei pH 10,7 untersucht. Bereits nach wenigen Minuten Kontaktzeit war die prozentuale Sorption von Pu(IV) bereits > 99 % und blieb über einen Zeitraum von elf Tagen nahezu konstant. Der Verteilungskoeffizient $\log(K_D, \text{L/kg})$ lag im Bereich von 4,3 bis 4,4.

Bei zwei Zementkernen (HCP – hardened cement paste) wurde nach 139 Tagen die Ausdiffusion von HTO beendet und in einer der beiden filterfreien Diffusionszellen die Eindiffusion von $8,1 \times 10^{-6}$ M $^{237}\text{Np(V)}$ gestartet. Als mobile Phase dient dabei VGL-Z (Zementporenwasser basierend auf VGL, pH 12,3). Der zweite Zementkern ist für ein Diffusionsexperiment mit Pu vorgesehen.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Batchexperimente zur Sorption von ^{14}C -Gluconat und an C-S-H-Phasen (C:S: 0,8 und 1,65) in VGL-C unter hyperalkalinen, anaeroben Bedingungen
- Bestimmung der Sorptionsisotherme von Fe(II) an C-S-H (Ca:Si 0,8) in MilliQ-Wasser unter der Verwendung der ECZ zur Elektrolyse von Fe(II)
- Fortführung der Experimente zur Sorption von Pu(IV) an C-S-H-Phasen in VGL-C bei geringem Fe-Untergrund
- Fortsetzung des Diffusionsexperiments in VGL-Z mit $^{237}\text{Np(V)}$ und Beginn der Diffusion von $^{238}\text{Pu(IV)}$ in HCP in Anwesenheit von Isosaccharinsäure (ISA).

5. Berichte, Veröffentlichungen

S. Dettmann, N.M. Huittinen, N. Jahn, J. Kretschmar, M.U. Kumke, T. Kutyma, J. Lohmann, T. Reich, K. Schmeide, S. Shams Aldin Azzam, L. Spittler, S. Stietz; Influence of gluconate on the retention of Eu(III), Am(III), Th(IV), Pu(IV), and U(VI) by C-S-H (C/S = 0.8), *Frontiers in Nuclear Engineering* (2023) DOI 10.3389/fnuen.2023.1124856

Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer: Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e. V., Bautzner Landstr. 400, 01328 Dresden		Förderkennzeichen: 02 E 11860B
Vorhabensbeschreibung: Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen (GRaZ II), Teilprojekt B		
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld: 4.1		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2020 bis 31.12.2024	Berichtszeitraum: 01.01.2023 bis 30.06.2023	
Gesamtkosten des Vorhabens: 719.658,00 EUR	Projektleiter: Dr. Katja Schmeide	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- Die Ergebnisse zur Eu(III)-Komplexierung durch Nitrilotriessigsäure (NTA), zur Eu(III)-Komplexierung durch Etidronsäure (1-Hydroxyethyliden-1,1-diphosphonsäure, HEDP), sowie zum Einfluss von Gluconat auf die U(VI)-Rückhaltung an C-S-H-Phasen mit einem C/S-Verhältnis von 0,8 wurden publiziert.
- Gegenwärtig werden umfangreiche NMR-Untersuchungen zur Ln(III)-Komplexierung durch Gluconat in Abhängigkeit von Konzentration und pH-Wert (pH 1-13) durchgeführt.
- Die experimentellen Untersuchungen zum Einfluss von Organika (PBTC, Gluconat, NTA) auf die U(VI)- bzw. Eu(III)-Rückhaltung an C-A-S-H-Phasen wurden weitergeführt. Hierfür wurden Proben mit C/S-Verhältnissen von 0,8, 1,2 und 1,6, sowie variierenden A/S-Verhältnissen eingesetzt. Es wurde sowohl mit der Aufnahme von Sorptionsisothermen begonnen als auch Experimente unter Variation der Zugabe-Reihenfolge von Radionuklid und Organik durchgeführt. Radionuklid- bzw. Ligand-Retentionsmechanismen werden gegenwärtig mittels TRLFS und NMR untersucht. TRLFS-Untersuchungen und Leaching-Experimente mit Organika-haltigen Porenwässern zeigten eine hohe Radionuklid-Retention an den C-S-H- und C-A-S-H-Phasen.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Der Einfluss von Ca(II) und Al(III) auf die Stabilität der Eu(III)-NTA-Komplexe soll mittels TRLFS sowie (^1H - und ^{27}Al -) NMR-Spektroskopie systematisch untersucht werden.
- Veröffentlichung der Ergebnisse zum Einfluss erhöhter Ionenstärke auf die U(VI)-Rückhaltung an C-A-S-H-Phasen.
- Weiterführung der Untersuchungen zur Ln(III)-Komplexierung durch Gluconat sowie zum Einfluss von Organika auf die U(VI)- bzw. Eu(III)-Rückhaltung an C-A-S-H-Phasen.

5. Berichte, Veröffentlichungen

- Dettmann, S., Huittinen, N., Jahn, N., Kretzschmar, J., Kumke, M.U., Kutyma, T., Lohmann, J., Reich, T., Schmeide, K., Shams Aldin Azzam, S., Spittler, L., Stietz, J.: Influence of gluconate on the retention of Eu(III), Am(III), Th(IV), Pu(IV), and U(VI) by C-S-H (C/S = 0.8). *Front. Nucl. Eng.* 2, 1124856 (2023).
- Friedrich, S., Sieber, C., Drobot, B., Tsushima, S., Barkleit, A., Schmeide, K., Stumpf, T., Kretzschmar, J.: Eu(III) and Cm(III) complexation by the aminocarboxylates NTA, EDTA, and EGTA studied with NMR, TRLFS, and ITC – an improved approach to more robust thermodynamics. *Molecules* 28, 4881 (2023).
- Heller, A., Senwitz, C., Foerstendorf, H., Tsushima, S., Holtmann, L., Drobot, B., Kretzschmar, J.: Europium(III) meets etidronic acid (HEDP): a coordination study combining spectroscopic, spectrometric, and quantum chemical methods. *Molecules* 28, 4469 (2023).
- Schmeide, K., Philipp, T., Huittinen, N., Sieber, C., Kretzschmar, J.: Bentonite and concrete: Efficient barrier materials for actinide retention under hyperalkaline conditions at increased ionic strengths and in presence of organics. EGU General Assembly 2023, 23.-28.04.2023, Vienna, Austria. (Vortrag)
- Gaona, X., Ait Mouheb, N., Altmaier, M., Bosbach, D., Deissmann, G., Geckeis, H., Kretzschmar, J., Schmeide, K., Stumpf, T.: Cement-based materials in the multi-barrier system of nuclear waste repositories – impact on radionuclide retention. Helmholtz Energy Conference 2023, 12.-13.06.2023, Koblenz, Germany. (Vortrag)

Auftragnehmer: Karlsruher Institut für Technologie (KIT) Institut für Nukleare Entsorgung (INE)		Förderkennzeichen: 02 E 11860C
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen – Phase II, (GRaZ II), Teilprojekt C		
Zuordnung zum FuE-Programm: Das Vorhaben bezieht sich auf die BMWi-Förderbekanntmachung Nukleare Sicherheits- und Entsorgungsforschung im 7. Energieforschungsprogramm „Innovationen für die Energiewende“ vom 7.1.2019: Fortentwicklung der Instrumente und Methodik für den Sicherheitsnachweis (Safety Case) vertiefte Untersuchungen zu Systemverhalten und -entwicklung sowie zu technischer Machbarkeit und Langzeitverhalten von Endlagerkomponenten		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2020 bis 30.09.2023	Berichtszeitraum: 01.01.2023 bis 30.06.2023	
Gesamtkosten des Vorhabens: 411.017,50 EUR	Projektleiter: Dr. Marcus Altmaier	

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

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

AP 1: Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen und Bentonit unter hyperalkalinen Bedingungen bei mittleren bis hohen Ionenstärken.

AP 2: Wechselwirkung von Actiniden mit organischen und silicatischen Liganden.

AP 3: Nachwuchsförderung im Bereich der nuklearen Entsorgung.

AP 4: Transfer der Erkenntnisse und Integration der Ergebnisse für den Sicherheitsnachweis.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP 1: Der Einfluss von EDTA auf die Sorption von Eu(III) an CSH-Phasen wurde bei höheren Calcium-zu-Silicium-Verhältnissen ($C/S = 1.4$) untersucht. Nach einer Sorptionszeit von 7 Tagen wird im NaCl- und auch CaCl₂-System ein signifikanter Rückgang der Eu(III)-Sorption gefunden ($10^{-2} \text{ mol kg}^{-1} \text{ H}_2\text{O}^{-1}$ EDTA). Während im NaCl-System und bei $C/S \leq 1.1$ nach 50 Tagen Sorptionszeit wieder eine quantitative Rückhaltung durch Einbau des Eu(III) in die CSH-Phase ($\log R_d > 6$) erfolgt, bleibt bei $C/S = 1.4$ das Eu(III) weiterhin stabil in Lösung ($\log R_d \approx 1$). TRLFS-Daten belegen die Präsenz von Ca-Cm-EDTA und Ca-Cm(III)-OH-EDTA Spezies. Es wurden keine in die CSH-Festphase eingebauten Cm(III)-Spezies nachgewiesen. Zusätzlich wurden strukturelle (EXAFS) und thermodynamische Charakterisierungen der beiden Komplexspezies durchgeführt.

AP 2: (i) Abschluss der Löslichkeitsexperimente (aus Untersättigung) im U(VI)-Silikat System. (ii) Fertigstellung des Manuskripts zu den TRLFS Analysen im U(VI)-Silikat System. (iii) Start der Löslichkeitsexperimente (aus Untersättigung) im alkalischen U(IV)-Silikat und U(IV)-Citrat System. (iv) Vorläufige thermodynamische Rechnungen für An(IV)-Citrat Wechselwirkungen unter alkalischen Bedingungen. Vergleich mit dem System Pu(IV)-Citrat.

AP 3: Organisation und Teilnahme von Frau Aline Thumm am internen Online-Doktorandenseminar der im GraZ II-Projekt arbeitenden Doktoranden der jeweiligen Verbundpartner.

AP 4: Es waren hierzu von KIT-INE keine Aktivitäten in dieser Projektphase geplant.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP 1: (i) Fortsetzung der TRLFS zum Einflusses von EDTA auf die Sorption von Cm(III) an CSH-Phasen im CaCl₂-System. Fokus auf langen Sorptionszeiten. Analyse der Langzeitstabilität der Ca-An(III)-EDTA und Ca-An(III)-OH-EDTA Komplexe. (ii) Auswertung der Daten zur strukturellen (EXAFS) und thermodynamischen Charakterisierung der ternären und quaternären Komplexe. (iii) Anfertigung eines Manuskripts zum Einfluss von EDTA auf die Sorption von Actiniden(III) an CSH-Phasen in salinaren NaCl/CaCl₂ Lösungen. Einreichung des Manuskripts zur Veröffentlichung in einem Peer-Review-Journal.

AP 2: (i) Einreichung des Manuskripts zu den TRLFS Analysen im U(VI)-Silikat System. (ii) Weiterführung der Löslichkeitsexperimente (aus Untersättigung) im alkalischen U(IV)-Silikat und U(IV)-Citrat System. (iii) Festphasencharakterisierung in den untersuchten Löslichkeitsexperimenten. (iv) Thermodynamische Rechnungen für An(IV)-Citrat Wechselwirkungen unter alkalischen Bedingungen. Bewertung des Einflusses von Ca²⁺ auf die Komplexbildung.

AP 3: Das interne Online-Seminar für die Doktorand/innen in GRaZ II wird fortgeführt und entsprechende inhaltliche Beiträge von KIT-INE vorbereitet. Geplante Konferenzteilnahmen von Aline Thumm: (i) Posterpräsentation bei Migration-Konferenz (September 2023 (Nantes, Frankreich), (ii) Vortrag oder Posterpräsentation bei „6th International Workshop on Mechanisms and Modelling of Waste / Cement Interactions“ (Prag, November 2023).

AP 4: Es sind hierzu von KIT-INE keine Aktivitäten in der kommenden Projektphase geplant.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Es wurden keine Berichte oder Veröffentlichungen im Berichtszeitraum erstellt.

Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer: Universität des Saarlandes Anorganische Festkörperchemie Postfach 15 11 50, 66041 Saarbrücken		Förderkennzeichen: 02 E 11860D
Vorhabensbezeichnung: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - GRaZ II Teilprojekt D: Retention, Fixierung und Remobilisierung von endlagerrelevanten Elementen und Elementgemischen an Zementalterationsphasen unter hochsalinaren und hyperalkalinen Bedingungen“		
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle		
Laufzeit des Vorhabens: 01.01.2021 bis 31.12.2024	Berichtszeitraum: 01.01.2023 bis 30.06.2023	
Gesamtkosten des Vorhabens: 656.091,50 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Kautenburger	

1. Vorhabensziele/Bezug zu den anderen Vorhaben

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

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

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

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP 1: Untersuchungen zur Retention von endlagerrelevanten Elementen bzw. Elementgemischen (WASTE Cocktail) an Korrosionsprodukten von Stahlbeton und Zementalterationsphasen unter dem Einfluss von hochsalinaren und hyperalkalinen Bedingungen

- AP 2: Untersuchungen zur Retention von ausgewählten endlagerrelevanten Elementen bzw. Elementgemischen an Festphasen unter dem Einfluss von Zementzusätzen unter hochsalinaren und hyperalkalinen Bedingungen
- AP 3: Untersuchungen zur Fixierung und Remobilisierung von endlagerrelevanten Elementen bzw. Elementgemischen aus dotierten Festphasen auch unter hochsalinaren und hyperalkalinen Bedingungen
- AP 4: Untersuchung zur Remobilisierungskinetik eingebauter Radionuklide aus dotierten Festphasen durch Konkurrenzreaktionen

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im Untersuchungszeitraum wurden Batchexperimente zum Rückhalt der Waste Cocktail Elemente (Zr(IV), Mo(VI), Ru(III), Pd(II), Cs(I), Sm(III), Eu(III) und U(VI)) an C-S-H-Phasen in An- und Abwesenheit von PBTC und Fe(II) in verdünnter Gipshuttlösung und vergleichend in 0,1 M NaCl begonnen. Am kommerziell erhältlichen Circosil ist der Rückhalt von 500 nM Zr(IV), Ru(III), Sm(III), Eu(III) und U(VI) in beiden Hintergrundelektrolyten mit >97% sehr hoch. Der hohe Rückhalt wird weder von der Anwesenheit anderer Waste Cocktail Elemente noch von 50 µM Fe(II) wesentlich beeinflusst. Mo(VI) wird in Einzelelementstudien nicht nachweisbar von Circosil zurückgehalten. In Anwesenheit des Waste Cocktails kann jedoch eine Retention von 5% (ohne Fe(II)) bis 15% (mit Fe(II)-Zugabe) beobachtet werden. Mögliche Ursachen hierfür können ternäre Oberflächenkomplexe zwischen an der C-S-H-Phase adsorbierten Waste Cocktail Elementen und MoO_4^{2-} oder eine Co-Fällung mit $\text{Fe}(\text{OH})_2$ sein. Die Adsorption von Cs(I) an Circosil ist stark abhängig von der Ionenstärke. In 0,1 M NaCl ist eine Adsorption von 52-58% in An- und Abwesenheit von Fe(II) und der anderen Waste Cocktail Elemente zu beobachten. In verdünnter Gipshuttlösung sinkt die Adsorption von Cs(I) aufgrund des hohen Na(I)-Überschuss auf 5-13% ab.

Bei den Desorptionsexperimenten von Zr(IV), Ru(III), Sm(III), Eu(III) und U(VI) an Circosil kann auch nach dreimaligem Austausch des Hintergrundelektrolyten (3 Desorptionsschritte) keine relevante Desorption beobachtet werden. Die Retention ist unter diesen Bedingungen in 0,1 M NaCl und verdünnter Gipshuttlösung irreversibel. Cs(I) desorbiert in jedem Desorptionsschritt von Circosil, sodass die adsorbierte Menge von anfangs 52% bis auf 32% im dritten Desorptionsschritt sinkt.

In ersten durchgeführten Versuchen komplexiert der Zementzusatz 2-Phosphonbutan-1,2,4-tricarbonsäure (PBTC) in Lösung alle untersuchten Elemente mit Ausnahme von Mo(VI) und Cs(I), sowie U(VI) in Anwesenheit eines Überschuss an Ca(II). Weitere Untersuchungen zum Einfluss von PBTC in Lösung und gebunden an die C-S-H-Phasen auf den Rückhalt des Waste Cocktails laufen.

Ferner wurde ergänzend zum vorherigen Untersuchungszeitraum ein Minisäulen-Sorptionsexperiment (MSE) mit Cs(I) an Circosil in 0,1 M NaCl durchgeführt, um den Einfluss der Ionenstärke des Eluenten auf den Rückhalt von Cs(I) im MSE zu untersuchen. Daraus ergaben sich für Cs(I) an Circosil in 0,1 M NaCl eine maximale Beladungsdichte (q_{\max}) von 0,63 mg/g und einen $\log(R_d)$ von 2,12, wohingegen Cs(I) an Circosil in 0,01 M NaCl ergab eine q_{\max} von 1,16 mg/g und ein $\log(R_d)$ von 2,39 zeigte. Demnach konnte auch durch die MSE der zu erwartende negative Einfluss der Ionenstärke des Eluenten auf den Cs(I) Rückhalt bestätigt werden. Um die entwickelte MSE-Methode zu validieren, wurden zunächst die beiden Experimente komplett unabhängig von den ersten Versuchen wiederholt und zusätzlich zwei Batch-Experimente mit einer Cs(I)-Konzentrationsreihe von 0,5 ppb (3,76 nmol/L) bis 50 ppm (376,2 µmol/L) in 0,01 M und 0,1 M NaCl durchgeführt. Es zeigte sich, dass die MSE in der Tat unabhängig reproduzierbar wiederholbar sind (Cs(I) an Circosil in 0,01 M NaCl: $q_{\max} = 1,10$ mg/g und $\log(R_d) = 2,35$; Cs(I) an Circosil in 0,1 M NaCl: $q_{\max} = 0,66$ mg/g und $\log(R_d) = 2,11$). Auf Grund der deutlich geringeren Anzahl an Datenpunkten im Batchexperiment war eine verlässliche Berechnung der Beladungsdichte nicht möglich. Die beiden Batchreihen ergaben aber für Cs(I) an Circosil in 0,01 M NaCl einen $\log(R_d)$ von 2,41 und für Cs(I) an Circosil in 0,1 M NaCl einen $\log(R_d)$ von 2,15. Somit kann mit Sicherheit gesagt werden, dass die entwickelten MSE reproduzierbar (und bei geringerem Zeitaufwand) die gleichen Ergebnisse wie Batch-Experimente produzieren (mit einem größerem Datensatz).

Weiterhin wurden erste MSE mit Pd(II), U(VI) und Eu(III) an Circosil in 0,01 M und 0,1 M NaCl durchgeführt. Hierzu sind aber, vor allem für Pd(II) und U(VI), noch zusätzliche Experimente erforderlich.

Ferner wurden erste Experimente mit einer Laserablation-ICP-MS-Kopplung (LA-ICP-MS) zur Untersuchung von Festphasen durchgeführt. Im Zuge dessen wurde eine Literaturbekannte Methode zur Bestimmung von Elementgehalten erfolgreich adaptiert bzw. reproduziert. Dabei konnten die Gehalte von Ti, Co, Tl und U in einem NIST 612 Standard mit einer Abweichung von $\leq 4,8\%$ bestimmt werden. Aufbauend darauf konnte eine neue Methode zur einfachen Bestimmung von Elementverhältnissen erarbeitet werden. Diese wurde ebenfalls mit dem NIST 612 Standard überprüft, wobei die Elementverhältnisse von Ti, Co, Tl und U mit einer Abweichung von $\leq 4,7\%$ bestimmt werden konnten. Mit dieser Methode konnte dann auch ein C/S-Verhältnis von 0,64 für Circosil bestimmt werden, was in sehr guter Übereinstimmung mit den Herstellerangaben (C/S = 0,65) und einer EDX-Messung (C/S=0,62) ist.

4. Geplante Weiterarbeiten

Im nächsten Untersuchungszeitraum werden die Batchexperimente zum Einfluss von PBTC auf den Rückhalt des Waste Cocktails an C-S-H-Phasen abgeschlossen. Zudem wird die MSE-Methode auf den restlichen Waste Cocktail angewandt und die LA-ICP-MS-Methode weiter auf die Untersuchung von C-S-H-Phasen (vor und nach Sorptionsexperimenten) angepasst.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer: Technische Universität München		Förderkennzeichen: 02 E 11860E
Vorhabensbezeichnung: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen – Phase II (GRaZ II) Teilprojekt E: Quantenmechanische Modellierung der Wechselwirkung von Actinoiden mit Zementphasen und ihren Lösungen		
Zuordnung zum FuE-Programm: FuE-Bereich Sicherheitsnachweis: Phänomene, Prozesse und Modelle		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2020 bis 31.12.2024	Berichtszeitraum: 01.01.2023 bis 30.06.2023	
Gesamtkosten des Vorhabens: 691.168,00 EUR	Projektleiter: Dr. S. Krüger	

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Vorhabensziele:

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

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

Das Untersuchungsprogramm umfasst folgende Arbeitspakete (AP):

1. Sorption an C-S-H-Phasen
2. Komplexbildung von Actinoiden
3. Unterstützung spektroskopischer Experimente

AP 1 umfasst periodische Modelle von C-S-H-Festkörpern und -Oberflächen und die Untersuchungen der Wechselwirkung von Actinoiden mit diesen. Weiterhin wird die Sorption von Eisen und ihre Konkurrenz mit Actinoiden untersucht. In AP 2 werden Silikatkomplexe sowie Komplexe mit Lösungskationen der Actinoiden in wässriger Lösung untersucht. AP 3 ist der Unterstützung der Interpretation spektroskopischer Experimente im Verbund durch entsprechende quantenmechanische Modellierungen im Bedarfsfall gewidmet.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP 1.4: Vergleich Th(IV) und U(IV); AP 1.5 Sorption und Konkurrenz Fe; AP 2.2: Oligosilikatkomplexe; AP 3: Unterstützung Experimente.

Der Vergleich der Sorption von Th(IV) und U(IV) an CSH-Phasen (AP 1.4) mit $C/S = 1$ wurde auf die Sorption in der Zwischenschicht sowie auf den Einbau in die CaO-Schicht erweitert. Derzeit liegen wie auch zur Sorption an der (001)-Oberfläche teilweise äquilibrierte Strukturen vor. Vorläufige Ergebnisse zeigen, dass Th(IV) mit einer Ausnahme als gleiche Hydroxospezies sorbiert wie U(IV), jedoch schwächer bindet. In einem Fall wurde eine schwächere Hydrolyse beobachtet. Der bevorzugte Bindungsmechanismus ist wie bei U(IV) der Einbau in die CaO-Schicht. Eine weitere Äquilibrierung der Strukturen und insbesondere eine gezielte Untersuchung des Hydrolyseverhaltens der Sorptionskomplexe ist vorgesehen.

Rechnungen zur Sorption von Fe(II) in CSH-Phasen (AP 1.5) für $C/S = 0.67$ und 1 konnten nahezu abgeschlossen werden. Neben der Sorption in der Zwischenschicht wurde nun auch der Einbau von Fe(II) in die CaO-Schicht als möglicher Sorptionsmechanismus betrachtet. Demnach bevorzugt Fe(II) Plätze mit niedriger Substratkoordination, auch an Defekten, und ein Einbau in die CaO-Schicht erscheint für $C/S = 1$ als möglich. Bisher wurden keine Plätze gefunden, die die gemessenen Abstände $Fe-Si > Fe-Ca$ aufweisen. Abschätzungen zeigen, dass Fe(II) bei höherem pH stärker an CSH bindet als U(VI). Im Vergleich zu U(VI) ergeben sich zudem mehr günstige Sorptionsplätze. Um den direkten Effekt von Fe(II) auf die U(VI)-Sorption in CSH und die Redoxstabilität von U(VI) gegenüber Fe(II) zu modellieren, werden derzeit Modelle untersucht, die zwei Fe^{2+} - und ein UO_2^{2+} -Ion enthalten. Angeregt durch Experimente des Projektpartners HZDR wurde die Sorption von U(VI) an Al-Substitutionen in CSH-Phasen an 7 weiteren Plätzen modelliert (AP 3). An einer verbrückenden Al-Substitution in den Silikatketten des CSH-Modells Tobermorit bindet U(VI) ähnlich stark wie an Silikat, wobei die Aluminatplätze bei niedrigerem C/S etwas bevorzugt werden.

Zur Charakterisierung der Komplexbildung von U(VI) durch Silikatliganden wurden Modellierungen zu Komplexen der Dikieselsäure fortgesetzt und zur ringförmigen Tetrakisieselsäure begonnen (AP 2.2). Bei den Dikieselsäurekomplexen erwies sich eine bidentate Koordination als weniger stabil als der entsprechende Chelatkomplex. Für die Komplexe der Dikieselsäure der Ladung 0 bis $+2$ e wurden Isomere untersucht. Die jeweils stabilsten Komplexe sind mindestens 10 kJ/mol stabiler als ihre Isomere, die damit wenig zur Speziation beitragen. Tetrakisieselsäure deprotoniert leichter als kleinere Kieselsäuren. Im Gegensatz zur Dikieselsäure ist die Bildung aus neutralen Monomeren geringfügig exotherm. Die Bildung des Anions aus Monomeren ist exothermer als für die Dikieselsäure. Damit ist die ringförmige Tetrakisieselsäure ein relevantes Modell einer Polykieselsäure. Bisherige Optimierungen von 1:1-Komplexen ergaben nahezu entartete Spezies mit bidentater oder Chelatkoordination der Ladung $+2$ e, mit monodentater oder Chelatkoordination der Ladung $+e$ sowie neutrale Chelatkomplexe. Die Komplexbildung ist für neutrale Liganden (niedriger pH) endotherm und für anionische Liganden exotherm. Diese Untersuchungen werden fortgesetzt.

Zur Arbeiten der Projektpartner TU Dresden und HZDR zur Komplexbildung des Modellzementadditivs PBTC werden derzeit Rechnungen zu PBTC und PBTC-U(VI)-Komplexen durchgeführt (AP 3). Deprotonierungsenergien von PBTC und interne Wasserstoffbrückenbindungen konnten qualitativ bestätigt werden, werden jedoch noch weiter untersucht. Vorläufige Ergebnisse zeigen, dass sich 1:1- und 1:2-U(VI)-PBTC-Komplexe exotherm bilden, während die Addition eines dritten Liganden endotherm ist. Derzeit werden Varianten der Komplexe aufgrund der Enantiomere des Liganden untersucht.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP 1.1: Modelle; AP 1.4: Vergleich Th(IV) und U(IV); AP 1.5 Sorption und Konkurrenz Fe; AP 2.2: Oligosilikatkomplexe; AP 3: Unterstützung Experimente.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine

Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer: Universität Potsdam (Physikalische Chemie), Am Neuen Palais 10, 14469 Potsdam		Förderkennzeichen: 02 E 11860F
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen – Phase II (GRaZ II) – Teilprojekt F: Universität Potsdam		
Zuordnung zum FuE-Programm: Die Arbeiten beziehen sich auf den FuE-Bereich 4 „ <i>Sicherheitsnachweis</i> “ mit dem FuE-Feld 4.1 „ <i>Phänomene, Prozesse und Modelle</i> “ des BMWi Förderkonzeptes (2015-2018) „Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle“		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2020 bis 31.12.2024	Berichtszeitraum: 01.01.2023 bis 30.06.2023	
Gesamtkosten des Vorhabens: 546.703,00 EUR	Projektleiter: apl. Prof. Dr. Michael U. Kumke	

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete²

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

- AP 1: Radionuklid-Rückhaltung an Zementalterationsphasen und Bentonit unter hyperalkalinen Bedingungen bei mittleren bis hohen Ionenstärken
- AP 2: Wechselwirkung von Actiniden mit organischen und silicatischen Ligandensystemen
- AP 3: Nachwuchsförderung im Bereich der nuklearen Entsorgung
- AP 4: Transfer der Erkenntnisse und Integration der Ergebnisse für den Sicherheitsnachweis

² Die Nummerierung der Arbeitspakete folgt der im Verbund festgelegten Einteilung.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

In AP1 wurden die begonnenen Untersuchungen zu der bei niedrigem C/S präzipitierten Ca-Si-Eu-Mischphase fortgeführt. Mittels SEM und EDX wurden die Morphologie und Zusammensetzung der Mischphase in C-S-H-Porenwasser bei verschiedenen Ligandenkonzentrationen bestimmt. Durch TRLFS-Experimente mit Gd(III) als zweitem Ln(III) konnte gezeigt werden, dass in der Mischphase ein Eu(III)-Eu(III)-Energietransfer stattfindet, der aktuell am weniger komplexen Referenzsystem $\text{Eu}(\text{OH})_3$ (am) ausführlicher untersucht wird. Die Aufklärung dieses Reaktionskanals ist sehr wichtig für die weitere Speziationsanalyse. Außerdem werden im AP1 TRLFS-Untersuchungen am binären Ln(III)/Gluconat-System (Ln=Eu, Sm) unter hyperalkalinen Bedingungen durchgeführt, um die in den vorangegangenen Sorptionsexperimenten beobachteten Eu-Glu-Komplexe zu identifizieren und charakterisieren. Die SEM/EDX-Analyse der C-S-H-Phasen nach den Sorptionsexperimenten wurde abgeschlossen.

Mittels Transienten-Absorptionsspektroskopie (TAS) wurde begonnen, verschiedene U(VI)-Komplexe zeitaufgelöst zu charakterisieren. In Zusammenarbeit mit den Projektpartnern der TU Dresden wurde das U(VI)-PBTC-System näher untersucht. Hierbei wurden auch Tieftemperatur-TRLFS Messungen zur Speziation durchgeführt, in Ergänzung zu TAS-Messungen. In den TAS-Experimenten wurden gezielt ultraschnelle Elektronenübertragungsprozesse betrachtet. Darüber hinaus wurden weitere Messungen an Gluconat-Systemen durchgeführt, vor allem in Kombination mit Kupfer als Metall. Auch die Speziation der reinen Liganden (z.B. Glu) wird weiter verfeinert. Zusätzlich wurde die Zwei-Photonenabsorption von Wasser (Photolyse, komplementär zur Radiolyse) und deren Einfluss auf sowohl Ligand als auch Metallzentrum der Proben durch Interaktion von freierwerdenden Elektronen untersucht. Ergänzend wurde die Flash-Photolyse zur Untersuchung kinetischer Prozesse der Gluconat-Systeme genutzt, da diese für langsame Kinetiken auf der μs -Zeitskala besser geeignet ist.

4. Geplante Weiterarbeiten

In AP1 sind weitere Sorptionsexperimente im ternären Eu(III)/C-S-H/Ligand-System (Ligand=NTA oder Gluconat) unter Variation der Zugabereihenfolge und des C/S-Verhältnis geplant. Zusätzlich sollen Sorptionsproben mit dem kommerziellen C-S-H-Material Circosil hergestellt werden und das Sorptionsverhalten (bzw. die Speziation) mit den selbst synthetisierten C-S-H-Phasen verglichen werden. Die Experimente zum binären Ln(III)/Gluconat-System werden fortgesetzt und gegebenenfalls auf die Zugabe von Ca(II) ausgeweitet. Die Bildung der Ca-Si-Eu-Mischphase soll durch Experimente in künstlichen Porenwässern mit unterschiedlichen Ca(II)- und Si(IV)-Konzentrationen sowie für weitere C/S-Verhältnisse weiter untersucht werden. Hier werden die Arbeiten mit den bisherigen Untersuchungen am Kieselsäuresystem zusammengeführt werden.

Die Zusammenarbeit mit den Projektpartnern der TU Dresden am U(VI)-PBTC-System wird fortgesetzt. Darüber hinaus wird die Hydrolyse von reinem U(VI)-Nitrat näher betrachtet. Auch weitere Untersuchungen der einzelnen Liganden werden mittels TAS und Flash-Photolyse durchgeführt. Die Arbeiten zur Kombination von TAS und Spektroelektrochemie werden fortgesetzt, u.a. die zeitaufgelöste Betrachtung von Cu(II) in Kombination mit verschiedenen organischen Liganden (z.B. Glu). Dies wird für U(IV)/U(VI) mittels transienten Absorptionsspektroskopie ebenfalls durchgeführt.

5. Berichte, Veröffentlichungen

- S. Dettmann et al.; Influence of gluconate on the retention of Eu(III), Am(III), Th(IV), Pu(IV), and U(VI) by C-S-H (C/S = 0.8). *Frontiers in Nuclear Engineering* (2023) DOI: 10.3389/fnuen.2023.1124856.

Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer: TU Dresden, Professur für Radiochemie und Radioökologie, Sachgebiet Strahlenschutz		Förderkennzeichen: 02 E 11860G
Vorhabensbezeichnung: Verbundvorhaben: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt G		
Zuordnung zum FuE-Programm: BMW-Förderbekanntmachung Nukleare Sicherheits- und Entsorgungsforschung im 7. Energieforschungsprogramm „Innovationen für die Energiewende“, BMW-Förderkonzept (2015-2018) „Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle“, FuE-Bereich 4, Pkt. 4.1		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2020 bis 31.12.2024	Berichtszeitraum: 01.01.2023 bis 30.06.2023	
Gesamtkosten des Vorhabens: 450.133,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Thorsten Stumpf	

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

In dem Verbundvorhaben wird die Rückhaltung von Radionukliden an Zementalterationsphasen und Bentonit unter geochemischen Bedingungen, die für die Tonformationen in Norddeutschland relevant sind, untersucht. Ziel ist die Aufklärung des geochemischen Verhaltens von Actiniden an/in Zementalterationsphasen und Bentonit unter dem Einfluss von Fe(II) und niedermolekularer organischer Liganden und Zementadditiven, die Erarbeitung grundlegender Erkenntnisse zur Wechselwirkung von Actiniden mit silikatischen und organischen Liganden bei mittleren bis hohen Ionenstärken und unter hyperalkalinen Bedingungen, die Nachwuchsförderung im Bereich nukleare Entsorgung sowie der Transfer und die Integration der Ergebnisse für einen Sicherheitsnachweis. Die Arbeiten dieses Teilprojektes beschäftigen sich mit dem Einfluss von PBTC (2-Phosphanobutan-1,2,4-tricarboxylsäure) auf die Speziation von Actiniden im System SiO₂/(Polysilikat)-Actinid-Organik unter endlagerrelevanten Bedingungen. PBTC wird in der Herstellung von Zement verwendet und kann während der Betondegradation freigesetzt werden, Es sollen konsistente thermodynamische Standarddaten zur Komplexierung von PBTC mit Actiniden über SIT-Modellierung bestimmt sowie der Einfluss von PBTC auf die Wechselwirkung von Actiniden in silikathaltigen Lösungen charakterisiert werden. Das Projekt liefert einen wichtigen Beitrag für eine thermodynamisch fundierte Langzeitsicherheitsanalyse von nuklearen Endlagern. Das Forschungsvorhaben erfolgt in enger Kooperation mit den Projekten der Universitäten Mainz, Saarbrücken, München, Potsdam und Heidelberg sowie dem Institut für Ressourcenökologie vom Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf und dem Institut für Nukleare Entsorgung vom Karlsruher Institut für Technologie.

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

Die Arbeiten dieses Projekt sind im Wesentlichen in das Verbundarbeitspaket AP2 „Wechselwirkung von Actiniden mit organischen und silikatischen Liganden“ angesiedelt. AP-TU1: Untersuchungen zur Wechselwirkung von redoxstabilen Actiniden verschiedener Oxydationsstufen mit PBTC. Dieses AP beinhaltet die thermodynamische Charakterisierung der Protonierung des PBTC-Liganden, die ausführliche thermodynamische und strukturelle Charakterisierung der Komplexierung der Actinide (u.a. Am(III), Cm(III), Pu(III), Th(IV), U(VI), ggf. inaktive Analoga Eu(III), Nd(III)) mit dem PBTC-Liganden im sauren und alkalischen pH-

Bereich als Funktion der Ionenstärke an NaCl und CaCl₂ sowie Untersuchungen zum Einfluss von Konkurrenzmetallionen (z.B. Fe²⁺) auf die Komplexbildung. Hauptaugenmerk liegt auf der Charakterisierung möglicher ternärer Komplexe. Entsprechende thermodynamische Standarddaten zur Komplexbildung ($\log_{10}\beta_{n,m}^0$, $\Delta_r H_m^0$, $\epsilon_{j,k}$) werden aus SIT-Modellierungen abgeleitet.

AP-TU2: Untersuchungen zum Einfluss von Zementadditiven auf die Wechselwirkung von redoxstabilen Actiniden/Lanthaniden in silikatischen Lösungen. In diesem AP wird der Einfluss von relevanten Liganden (Citrat, PBTC, Gluconat) auf die Eigenschaften von silikatischen Lösungen/Suspensionen bezüglich ihrer Speziation und daraus abgeleitet auf die Wechselwirkungen mit Actiniden untersucht.

Geplant sind Batchsorptionsuntersuchungen mit Actiniden in gut charakterisierten (Poly)silicat-Ligand-Suspensionen. Die Sorptionsisothermen und Verteilungskoeffizienten (Kd-Werte) sollen als Funktion der Ionenstärke (bis 3 m NaCl, CaCl₂) und des pH-Wertes bestimmt werden.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP-TU1b) Die Arbeiten zur spektroskopischen und damit strukturellen Charakterisierung der U(VI)-PBTC-Komplexbildung wurden fortgeführt und vorläufig abgeschlossen. Die verwendeten Methoden umfassten Fluoreszenz-, UV-Vis-, NMR-, IR- und Raman-Spektroskopie sowie DFT Rechnungen. Die Untersuchungen ergaben einen 1:2 U(VI)-PBTC-Komplex bei Überschuss an Ligand über dem gesamten pH Bereich. Die Anbindung des U(VI) erfolgt monodentat über die Phosphonat- und der zweiten Carboxyl-Gruppe, wodurch ein Chelatkomplex mit einem 6-Ring entsteht. Geringfügige Änderungen in den Raman und UV-Vis Spektren sind auf die Deprotonierung des Komplexes und der damit veränderten Umgebung durch Wegfallen von Wasserstoffbrückenbindungen zurückzuführen. Anhaltspunkte für eine strukturelle Änderung der Anbindung des U(VI) an das PBTC konnten mit Hilfe der NMR und IR Spektroskopie ausgeschlossen werden. NMR Untersuchungen zeigten außerdem syn- und anti-Anbindungen der beiden PBTC-Moleküle an das U(VI). TRLFS und TAS Untersuchungen des Systems wurden gemeinsam mit dem Projektpartner der Universität Potsdam durchgeführt. Die Daten werden aktuell ausgewertet. Theoretische Berechnungen des Projektpartners der Universität München unterstützen die bisher erhaltenen Aussagen zum U(VI)-PBTC-Komplex. ESI-MS-Untersuchungen haben keine zusätzlichen Informationen zur strukturellen Charakterisierung des Komplexes erbringen können. Die Ergebnisse werden aktuell in einem Manuskript für die Veröffentlichung zusammengefasst.

Erste ausführliche Untersuchungen des Eu(III)-PBTC-Systems im pH Bereich von 4 bis 10 wurden mittels TRLFS durchgeführt. Erste PARAFAC-Auswertungen der Ergebnisse ergaben, dass zwei Spezies im untersuchten pH- und Konzentrationsbereich gebildet werden. Die erste Komplexspezies wird hauptsächlich bei geringen pH-Werten gebildet, während die zweite Spezies vorrangig ab einem pH \geq 6 auftritt. Eine Komplexbildung bei den gewählten Versuchsparametern erfolgte erst ab einem pH \geq 4.

ITC-Experimente (ITC = isotherme Titrationskalorimetrie) in den bisher betrachteten Systemen Eu(III)-PBTC und U(VI)-PBTC werden stark von einer stetigen pH-Abnahme beeinflusst, hervorgerufen durch die Zwangsdeprotonierung einer Carboxylgruppe. Eine exakte Auswertung der Kurven und damit die Bestimmung der thermodynamischen Daten ist mit den bisherigen Auswertetools nicht möglich. Erste ITC-Untersuchungen mit dem Eu-PBTC-System in verschiedenen Puffersystemen (MES-, TRIS-Puffer, pH < 7) zeigen eine tendenzielle Abhängigkeit der ITC-Kurven und damit der Eu-PBTC-Komplexierungsenthalpien von der Pufferionisationsenthalpie. Derzeit wird geprüft, inwieweit dieser Ansatz für eine exakte Bestimmung der Eu-PBTC-Komplexierungsenthalpien genutzt werden kann.

4. Geplante Weiterarbeiten

1) Veröffentlichung der Ergebnisse des U(VI)-PBTC-Systems in ausgewählter Fachzeitschrift und internationalen Konferenzen.

- 2) Fortführen der spektroskopischen Untersuchung des Eu(III)/Nd(III)-PBTC-Systems mittels NMR, IR und UV-Vis Spektroskopie
- 3) Untersuchungen zur Charakterisierung der strukturellen Änderungen des U(VI)-PBTC-Komplexes bei Energieeintrag (z.B. Laserlicht, Gammastrahlung, etc.)
- 4) Fortführung der Zusammenarbeit mit den Projektpartnern Uni Potsdam (TAS, cryo-TRLFS), Uni München (theoretische Berechnungen), HZDR (NMR-Spektroskopie) zum U(VI, IV))-PBTC-System
- 5) Fortführung der ITC-Experimente (ITC = isotherme Titrationskalorimetrie) im Eu-PBTC sowie U(VI)-PBTC-System: Finden neuer Ansätze/Ideen im Experiment als auch in der Auswertung der Titrationskurven, den Einfluss der pH-Änderungen während der kalorimetrischen Titration auf die Titrationskurven und damit auf die thermodynamischen Daten beschreiben zu können

5. Berichte, Veröffentlichungen

keine im Berichtszeitraum

Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer: Universität Heidelberg		Förderkennzeichen: 02 E 11860H
Vorhabensbezeichnung: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen (GRaZ II); Teilprojekt H: Spektroskopische Speziation von Ln-/An-Komplexen mit silicatischen und (zement)organischen Liganden		
Zuordnung zum FuE-Programm: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle: Daten und Instrumente für den Sicherheitsnachweis		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2020 bis 31.05.2025	Berichtszeitraum: 01.01.2023 bis 30.06.2023	
Gesamtkosten des Vorhabens: 403.292,00 EUR	Projektleiter: Frau Prof. Dr. Petra J. Panak	

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

AP 2.1 Komplexbildung von Actiniden mit ausgewählten organischen Referenzliganden

AP 2.2 Komplexbildung von Actiniden mit ausgewählten Zementadditiven

AP 2.3 Wechselwirkung von Actiniden mit silicatischen Systemen: Speziation und Thermodynamik

AP 3 Nachwuchsförderung im Bereich der nuklearen Entsorgung

AP 4 Transfer der Erkenntnisse und Integration der Ergebnisse für den Sicherheitsnachweis

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im Rahmen des Arbeitspakets AP 2.3 wurde mittels zeitaufgelöster Laserfluoreszenzspektroskopie (TRLFS) die Speziation von Cm(III) mit Si-Konzentrationen unterhalb der Sättigungsgrenze ($5 \cdot 10^{-4}$ M bis $1 \cdot 10^{-3}$ M) untersucht. Dabei wurde in Anwesenheit von Ionenstärken von $I_m(\text{NaCl}) = 0.01$ M bis zu $I_m(\text{NaCl}) = 0.81$ m der pH-Wert sukzessiv von pH = 4 zu pH = 6 erhöht. Damit war es möglich, die vorwiegend gebildete Monosilicatspezies $\text{Cm}[\text{H}_3\text{SiO}_4]^{2+}$ näher zu charakterisieren. Es wurde festgestellt, dass mit zunehmender Ionenstärke die Stabilitätskonstanten abnehmen. Weiterhin wurden Untersuchungen bei $I > 0.81$ m durchgeführt, allerdings wurde kaum eine Komplexbildung beobachtet, sodass eine Speziation und somit die Bestimmung der Stabilitätskonstante nicht möglich war. Somit wurde die Speziation lediglich bis Ionenstärke $I_m(\text{NaCl}) = 0.81$ m durchgeführt. Durch Anwendung des SIT-Modells wurden für $I_m = 0$ eine Stabilitätskonstante $\log \beta^0 = 7.40 \pm 0.3$ und der Ioneninteraktionskoeffizient $\Delta\varepsilon = 0.22 \pm 0.2$ bestimmt. Die erzielten Ergebnisse stimmen sehr gut mit der Literatur überein.

Darüber hinaus wurden für die oben beschriebenen Systeme temperaturabhängige Komplexbildungsstudien im Temperaturbereich von 10 bis 90 °C durchgeführt. Durch einen van't Hoff-Plot wurde für jedes untersuchte System bei der jeweiligen Ionenstärke die Reaktionsenthalpie und Reaktionsentropie bestimmt. Es konnte beobachtet werden, dass die Reaktionsenthalpie und Reaktionsentropie mit abnehmender Ionenstärke zunehmen. In allen Fällen ist die Reaktion jedoch endotherm und entropiegetrieben. Durch Extrapolation der Reaktionsenthalpien mittels SIT wurde die Standardreaktionsenthalpie $\Delta_R H^0 = 19 \pm 0.5$ kJ/mol und die Standardreaktionsentropie $\Delta_R S^0 = 205.4 \pm 21$ J/mol K ermittelt, welche sehr gut mit experimentellen Werten in der Literatur übereinstimmen. Darüber hinaus hat sich ergeben, dass die Stabilitätskonstanten aus den temperaturabhängigen Untersuchungen bei 298 K im Fehlerbereich mit den Werten der pH-abhängigen Messung bei gleicher Temperatur übereinstimmen. Auch hierbei zeigte sich eine Abnahme der Stabilitätskonstanten mit zunehmender Ionenstärke, was bedeutet, dass für Ionenstärken $I_m(\text{NaCl}) \geq 0.81$ m keine Quantifizierung der Monosilicatspezies $\text{Cm}[\text{H}_3\text{SiO}_4]^{2+}$ mehr möglich war.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Speziationsuntersuchungen zur Wechselwirkung von Cm(III) mit Silicaten bei höheren pH-Werten als Funktion der Ionenstärke im NaCl-System
- Speziationsuntersuchungen zur Wechselwirkung von Cm(III) mit Monosilicat im CaCl_2 -System
- Untersuchung der Wechselwirkung von An(III)/Ln(III) mit polymeren Polycarboxylat-Superplasticizern ab einem pH-Wert von 7.

5. Berichte, Veröffentlichungen

- Bachelorarbeit (Kim Warth): „Komplexbildung von Curium(III) mit Monosilicat als Funktion von Ionenstärke und Temperatur“, Universität Heidelberg (2023).

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 11870A	
Vorhabensbezeichnung: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren II (UMB-II)			
Zuordnung zum FuE-Programm: Im Projektförderprogramm des BMWi – Forschungsförderung zur nuklearen Sicherheit (2021-2025) – ist das Vorhaben dem FuE-Bereich C2 „Sicherheits- und Endlagerkonzepte; Endlagertechnik und (geo-)technische Barrieren“, FuE-Feld C2.3 „Geotechnische und technische Barrieren“, FuE-Thema „Untersuchungen zu Material und an Komponenten von Barriersystemen, einschließlich zu Prozessen der Radionuklidrückhaltung durch geotechnische Barrieren (Schnittstelle zu FuE-Feld C3.1)“ sowie dem FuE-Feld C3.1 „Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-)Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung“, FuE Thema „Weiterentwicklung des Verständnisses zu den im Endlagersystem und der Biosphäre ablaufenden thermischen, hydraulischen, mechanischen, chemischen und biologischen (THMCb-)Prozessen und ihrer Kopplung“ zuzuordnen.			
Laufzeit des Vorhabens: 01.01.2021 bis 31.12.2023		Berichtszeitraum: 01.01.2023 bis 30.06.2023	
Gesamtkosten des Vorhabens: 963.287,72 EUR		Projektleiter: Dr. Artur Meleshyn	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Zum Erreichen der oben genannten Ziele sind aufeinander abgestimmte experimentelle und analytische Arbeiten in den Laboren der Verbundprojektpartner sowie quantenchemische Modellierungen und geochemische Modellierung vorgesehen. Im AP 1 „Zersetzung von Karbonaten und CO₂-Freisetzung“ (Federführung: GRS) sollen dafür im GRS-Labor Versuche mit Bentoniten, reinen Mineralphasen und aus diesen hergestellten Mineralgemischen in Metallzylindern bei 120°C sowie anschließende Gasanalysen und Bestimmungen der Karbonatgehalte, pH-Werte und Zusammensetzungen der Kontaktlösungen durchgeführt werden. Die Versuche und ihre Auswertung sollen durch die unterstützende geochemische Modellierung begleitet werden. Im AP 6 koordiniert die GRS die Arbeiten im Verbundprojekt.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im Berichtszeitraum wurde die Versuchsreihe zur Ermittlung der Abhängigkeit der Karbonatzersetzungsrate von der Art des Karbonatminerals in Kontakt mit reaktiven Mineralphasen Pyrit und Quarz gestartet. Sie besteht aus 15 Gemischen, die aus Kalzit bzw. 10 weiteren Karbonatmineralen sowie Quarz und Pyrit (in unterschiedlichen Anteilen für Batches mit Kalzit) zusammengesetzt wurden. Die Versuchsreihe soll durch die Analysen der freigesetzten Gase begleitet. Eine weitere Versuchsreihe, die die Reproduzierbarkeit der verwendeten Methode und die Zersetzung des Kalzits in Bentonit durch die Zugabe von Pyrit untersucht, wurde samt Gasanalysen abgeschlossen.

Die Koordination des Verbundprojektes bestand in der Organisation des fünften Präsenzworkshops, welches am 4. Mai 2023 durch die TU München in Garching ausgerichtet wurde.

4. Geplante Weiterarbeiten

Abschluss der laufenden Versuchsreihen, Vorbereitungen und Beginn der weiteren Versuchsreihen im AP1; Organisation des vierten Projektworkshops im AP6.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine

Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer: Helmholtz-Zentrum Dresden – Rossendorf e. V. Institut für Ressourcenökologie		Förderkennzeichen: 02 E 11870B
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt B		
Zuordnung zum FuE-Programm: Teilprojekt B: Metallkorrosion in Bentoniten mit/ohne mikrobiellen Einfluss		
Laufzeit des Vorhabens: 01.01.2021 bis 31.12.2023	Berichtszeitraum: 01.01.2023 bis 30.06.2023	
Gesamtkosten des Vorhabens: 359.046,00 EUR	Projektleiter: Dr. Nicole Matschiavelli	

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

Beziehung zu anderen Vorhaben

Innerhalb der Kooperationspartner (Förderkennzeichen 02E11870)

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

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

Die Thematik des UMB-II Projektes wird in 6 Arbeitspaketen (AP) bearbeitet, wobei das HZDR an der Bearbeitung des AP 4 „Metallkorrosion in Bentoniten mit/ohne mikrobiellen Einfluss“ beteiligt ist.

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

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Die mikrobielle Population der Bentonite B27 und GMZ-001 und deren Einfluss auf die Korrosion von Gusseisenplättchen (Typ GGG40) soll mit Hilfe von Mikrokosmen analysiert werden. Die Ansätze enthalten einen der beiden Bentonite, GGG40-Plättchen und synthetische, anaerobe Opalinuston-Porenlösung. Für die Simulation einer beginnenden Korrosion, werden einige Ansätze mit Wasserstoff versehen. Kontrollansätze beinhalten zweifach autoklavierten Bentonit. Die Mikrokosmen inkubieren jeweils bei 30 und 70°C und werden im Verlauf des Projektes zu unterschiedlichen Zeitpunkten beprobt.

Nach 596 Tagen Inkubation erfolgte die vierte Beprobung der Mikrokosmen. B27-Ansätze, welche bei 37°C in Anwesenheit von Wasserstoff und/oder GGG40 inkubierten, zeigten die Bildung von Sulfiden in Lösung und in der Gasphase. Simultan konnte eine Verringerung der Sulfat-Konzentration sowie die Bildung von Azetat im Porenwasser nachgewiesen werden. Eisensulfide konnten *via* SEM/EDX auf der Metalloberfläche identifiziert werden. Ähnlich zu den vorherigen Beprobungen, zeigte sich auch nach 596 Tagen Inkubation kein Hinweis auf mikrobielle Aktivität, wenn die B27-Ansätze bei 70°C inkubierten bzw. sterilen B27 Bentonit enthielten.

In GMZ-Mikrokosmen, welche mit GGG40-Plättchen mit und ohne Wasserstoff versehen worden sind, konnte nach 596 Tagen Inkubation bei 37°C erstmalig eine schwarze Verfärbung sowie eine Verringerung der Sulfat-Konzentration nachgewiesen werden – Hinweise auf mikrobielle Aktivität. Eisensulfide konnten auch hier erstmalig auf der GGG40-Oberfläche nachgewiesen werden. GMZ-Ansätze, welche bei 70°C inkubierten bzw. welche sterilen GMZ Bentonit beinhalteten, waren diesbezüglich weiterhin unauffällig.

Unabhängig vom Bentonit, zeigen alle Mikrokosmen, in denen sich GGG40 Plättchen befinden, einen erhöhten Druck in der Gasatmosphäre sowie eine beschleunigte Bildung von Wasserstoff – insbesondere bei 70°C. Verglichen zu den vorherigen drei Beprobungen ist die Fe(II)-Freisetzung nach 596 Tagen in allen GMZ- und B27-Ansätzen deutlich langsamer und erreicht ein Plateau.

Die DNA konnte im 5. Berichtszeitraum von insgesamt 18 weiteren GMZ- und B27-Ansätzen erfolgreich isoliert und amplifiziert werden.

4. Geplante Weiterarbeiten

Im sechsten Berichtszeitraum des UMB-II Projektes soll die gereinigte DNA der 18 Proben sequenziert werden. Des Weiteren wird eine fünfte Beprobung nach insgesamt etwa 800 Tagen Inkubation erfolgen. Im Fokus stehen die Bestimmung der mikrobiellen Diversität und deren Abgleich mit den beobachteten Veränderungen hinsichtlich geochemischer Parameter sowie korrosions-spezifischer Oberflächen-Analysen der inkubierten GGG40 Plättchen (SEM-EDX). Zudem sind weitere Analysen zur Oberflächenrauigkeit der GGG40-Plättchen sowie mineralogische Analysen der inkubierten Bentonite geplant (in Zusammenarbeit mit den Universitäten Hannover und Greifswald).

5. Berichte, Veröffentlichungen

Publikationen: - Bisher keine-

Vorträge:

Matschiavelli, N., Microbial Influence on Cast Iron Corrosion under Repository-Relevant Conditions; 5th project meeting UMB-II, Garching, München, 04.05.2023.

Matschiavelli, N., Studying the microbial diversity in bentonite and its influence on the corrosion of container materials in static microcosms. Instituts-interner Vortrag; HZDR, Dresden, 09.03.2023.

Matschiavelli, N., Microbial Influence on Cast Iron Corrosion – an update on the UMB-II project. Instituts-interner Vortrag; HZDR, Dresden, 25.05.2023.

Poster: -Keine in diesem Berichtszeitraum-

Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer: Universität Greifswald, Domstr. 11, 17489 Greifswald		Förderkennzeichen: 02 E 11870C
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren- Phase II (UMB II), Tielprojekt C		
Zuordnung zum FuE-Programm: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld: 4.1, Wirtsgestein: Salz + Ton		
Laufzeit des Vorhabens: 01.01.2021 bis 31.12.2023	Berichtszeitraum: 01.01.2023 bis 30.06.2023	
Gesamtkosten des Vorhabens: 244.830,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. L.N. Warr	

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

- AP-Nr. 3.1: "Reinigung und Analyse von Smektitproben und anderen Mineralen"
- AP-Nr. 3.2: "Mischung und Charakterisierung von synthetischen Bentonitproben für Batch-Reaktor-Experimente an GRS, UG und BGR"
- AP-Nr. 3.3: "Monitoring und mineralogische/geochemische Analysen der Experimente (XRD, XRF, CEC usw.)"
- AP-Nr. 3.4: "Weitergehende Analyse von Batch-Experimenten und Datenanalysen"
- AP-Nr. 3.5: "Elektronenmikroskopische Untersuchung der Versuchsprodukte"
- AP-Nr. 3.6: "Datenanalyse und Vergleich von synthetischen Bentoniten mit natürlichen Mischungen"
- AP-Nr. 3.7: "Auswertung (Mechanismen)"
- AP-Nr. 3.8: "Berichte"

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Die dritte Runde der Batch-Reaktor-Experimente, die Teil des AP-Nr. 3.2 ist, wurde abgeschlossen und die Proben für die Analyse entnommen. Die Ergebnisse der mineralogischen und geochemischen Untersuchungen mittels XRD, TEM und EDX-SEM zeigen, dass der Grad der Smektit-Umwandlung von der Art des verwendeten K-Salzes und der Rotation der Chargenproben abhängt. Dies scheint eher mit der erhöhten K⁺ Aktivität in den Lösungen und dem Vorhandensein von Oxalat zusammenzuhängen als mit den pH-Unterschieden. Die K-Oxalat Mischungen zeigen stärkere Veränderungen als die KCl Mischungen selbst bei ähnlichen pHs. Das letztgenannte Experiment wurde durchgeführt, um eine etwaige katalytische Wirkung zu isolieren, die unabhängig von der Aktivität von K⁺ sein könnte. Die Versuche, die mit Rotationsöfen durchgeführt wurden, zeigen eine höhere Reaktivität als die statischen Versuche. Ein erheblicher Teil des Smektit wurde in ein glimmerhaltiges Tonmineral mit „mixed-layer“ Strukturen umgewandelt, die zur Zeit noch charakterisiert und modelliert werden.

Der Plan für die nächste Versuchsserie umfasst einen Satz mit K-Oxalat und einen weiteren Satz ohne K-Salze bei einer Rotationsgeschwindigkeit von 20 U/min bei 150 °C und 120 °C.

Da Anfang 2023 ein neuer Techniker eingestellt wurde, haben wir damit begonnen, den Rückstand an Proben aus den letzten vier Monaten mit EDX-SEM zu analysieren. Mit unserem neuen TEM-Gerät haben wir auch damit begonnen, alle Proben aus den Batch-Experimenten eingehend zu analysieren, indem wir eine hochauflösende Abbildung der Gitterstreifen und der Nanobeam-Elektronenbeugungsmuster verwendeten. Wir konnten Veränderungen in der Anordnung der umgesetzten Materialien im Vergleich zum Ausgangsmektit sowie Unterschiede in den Elektronenbeugungsmustern feststellen, die den in der Literatur dokumentierten 1M-CV-IIIit-Polytypen ähnlich sind.

Wir haben auch damit begonnen, die chemische Zusammensetzung der Lösungen der letzten beiden Batch-Versuche mit MP-AES zu analysieren. Die Wasserproben für die Analyse wurden vorbereitet und zur Analyse eingereicht.

Weitere Proben wurden für die nächste von der GRS geplante Versuchsserie vorbereitet. Dazu gehörten die Mikronisierung, die Herstellung von Mischungen und XRD-Messungen zusammen mit Quantifizierungen durch Rietveld-Verfeinerung. Darüber hinaus wurde die Mineralogie der Proben aus dem HZDR mittels EDX-SEM untersucht, um neue Mineralphasen zu identifizieren, die sich in der Eisen-Bentonit-Kontaktzone unter dem Einfluss mikrobieller Aktivitäten gebildet haben.

4. Geplante Weiterarbeiten

Da noch weitere Batch-Experimente erforderlich sind, stellen wir derzeit mehr reine Mineralphasen her für die anstehenden Experimente. Diese Arbeiten umfassen die Herstellung von reinem Smektit und die Partikelgrößentrennung der Begleitmineralien.

Es sind weitere Batch-Reaktorexperimente bei niedrigeren und höheren Temperaturen geplant, um die Reaktionskinetik und die Geschwindigkeit der Smektitänderung mit und ohne organischen Katalysatoren zu bestimmen, welches wir als Vorhersageinstrument verwendet können. Die Durchführung dieser Arbeiten würde wahrscheinlich eine 18-monatige Verlängerung des Projekts erfordern. Die Bestimmung der ersten Arrhenius-Reaktionsratengleichung für Bentonitumwandlung, wäre ein wichtiger Schritt bei der Vorhersage langfristiger Reaktionszustände und der Integrität von Barrieren in unterirdischen Endlagern.

Wir arbeiten noch an der TEM-Analyse der Proben aus früheren Batch-Reaktor-Experimenten, da uns das technische Personal lange fehlte. Wir werden das TEM weiterhin nutzen, da es derzeit das effizienteste Instrument ist, um die Zusammensetzung und Kristallstruktur von Smektit im Detail zu bestimmen.

Was unseren Zeitplan anbelangt, so liegen wir nun 12 Monate hinter unserem Arbeitsplan zurück und würden von einer Verlängerung der Projektaktivitäten profitieren, um unsere aktuellen Projektziele zu erreichen. Eine Verlängerung des Projekts um insgesamt 18 Monate wäre erforderlich, um eine wichtige kinetische Gleichung zur Vorhersage der beschleunigten Smektit-Reaktionsraten in Gegenwart organischer Säuren zu entwickeln.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Kandler, Julia. (2023) Batch Reactor Alteration of Nontronite at 180 °C in 0.1 M NaCl Solution: Constraining the Role of Accessory Minerals and K-Oxalate Additives. Master Arbeit an der Universität Greifswald, Institut für Geographie und Geologie.

Julia Kandler, Ritwick Sudheer Kumar, Laurence N. Warr & Georg H. Grathoff (2023) Batch Reactor Alteration of the Hedemünden Nontronite at 180 °C in 0.1 M NaCl Solution: Constraining the Role of Accessory Minerals and K-Oxalate Additives. Clay Minerals Society annual meeting in Austin, Texas, USA. 20.-25.Mai 2023

Sudheer Kumar, R.; Warr, L.; and Grathoff, G., Experimental constraints on smectite alterations in the presence of accessory minerals at 180°C with and without organic acids, (Poster presentation) EUROCLAY 2023-International Conference of European Clay Groups Association, Bari-Italy 24-27 July 2023..

Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer: Technische Universität München		Förderkennzeichen: 02 E11870D
Vorhabensbezeichnung: Verbund Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren (UMB) Teilprojekt D: Fe(II)/Fe(III)-Redoxreaktion auf atomarem Niveau in Smektiten		
Zuordnung zum FuE-Programm: FuE-Bereich 4 Sicherheitsnachweis. FuE-Feld 4.1 Phänomene, Prozesse und Modelle		
Laufzeit des Vorhabens: 01.01.2021 bis 31.12.2023	Berichtszeitraum: 01.01.2023 bis 30.06.2023	
Gesamtkosten des Vorhabens: 302.335,00 EUR	Projektleiter: Dr. S. Krüger	

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Vorhabensziele:

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

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

Das Untersuchungsprogramm umfasst folgende Arbeitspakete (AP):

1. Methoden und Modelle
2. Fe(II) in Smektiten
3. Fe(II) in und an Smektitoberflächen
4. Zwischenschichtionen in Smektiten
5. Eisenkorrosionsphasen

Die zentralen Themen des Projektes sind die rechnerische Modellierung von Fe(II)-Substitutionen in Smektiten (AP 2) in Abhängigkeit von Struktur, Ladung und anderer Substitutionen sowie die Abschätzung entsprechender Redoxpotentiale für Fe(II)/Fe(III). Weiterhin werden Fe(II)-Substitutionen in Oberflächen von Smektiten sowie die Sorption von Fe(II) an Oberflächen untersucht (AP 3), um Fe(II) in Smektiten umfassend zu charakterisieren. Daneben ist vorgesehen, Solvation und Koordination von Zwischenschichtionen, die geladene Substitutionen wie Fe(II) kompensieren, zu untersuchen. Mit der Berechnung relativer Energien von Eisenkorrosionsphasen werden Arbeiten der Projektpartner unterstützt.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP 1: Modelle und Methoden; AP 2 Fe(II) in Smektiten

Quantenmechanische Rechnungen zu oktaedrischen Fe-Substitutionen in Smektiten wurden insbesondere für Fe(II) in cis-vakantem Pyrophyllit, Montmorillonit und Beidellit fortgeführt (AP 2). Bisher wurden für oktaedrische Fe(II)-Substitutionen in Smektiten zufällig entweder eine tiefere oder eine wahrscheinlich metastabile Konfiguration höherer Energie erhalten. Daher konnten Redoxpotentiale lediglich über die annähernd konstante Energiedifferenz abgeschätzt werden. Mittels einer kürzlich entwickelten Methode (AP 1) ist es nun gelungen, auch für Strukturen, für die nur die energetisch höhere Konfiguration vorlag, tiefere optimale Strukturen zu erhalten. Damit konnten für alle Anordnungen von Fe(II) in Pyrophyllit und Montmorillonit vergleichbare Strukturen und Energien berechnet werden. Für oktaedrisches Fe(II) in Beidellit wurden Modellierungen aller möglichen Anordnungen entsprechend vervollständigt. In allen untersuchten Smektitmodellen erwies sich die Energie der metastabilen Konfiguration von Fe(II) als leicht variabel, mit Energiedifferenzen zum Grundzustand von meist 120 -140 meV. Der mittlere Fe-O-Abstand der metastabilen Konfiguration ist dabei 1.5-2.5 pm kürzer als der des Grundzustandes und umgekehrt proportional zur Energiedifferenz. Geringere Energiedifferenzen zusammen mit höheren Differenzen des mittleren Fe-O-Abstandes wurden nur für Fe(II) neben einer Mg-Substitution in Montmorillonit erhalten.

Verbesserte Ergebnisse für Pyrophyllit zeigen, dass für Fe(III) ein Platz neben Fe(II) ungünstiger ist als neben Mg(II) in Montmorillonit. Der Energieanstieg mit sinkendem Abstand zwischen Fe(II) und Mg(II) in Montmorillonit oder Fe(II) in Pyrophyllit (Vergleich von 10 Anordnungen) ist vergleichbar (< 45 kJ/mol). Damit ergeben sich Fe(II)/Fe(III)-Redoxpotentiale in Pyrophyllit, die bei einer benachbarten Fe(III)-Substitution um etwa 80 mV abfallen und bei einer Fe(II)-Substitution um bis zu 350 mV. Geringfügig höhere Werte werden in Montmorillonit neben einer Mg(II)-Substitution erreicht. Hinsichtlich der Position der Na^+ -Gegenionen verbesserte und vervollständigte Daten für Beidellit (16 Anordnungen) ergeben, dass Fe(III) bevorzugt nahe an tetraedrischen Al(III)-Substitutionen sitzt, während Fe(III) entfernte Positionen bevorzugt. Da dieser Trend für Fe(III) im Gegensatz zu eisen-substituiertem Pyrophyllit und Montmorillonit gegenläufig zum Verhalten von Fe(II) verläuft, ergeben sich niedrigere Effekte auf das Redoxpotential. Die tiefsten Werte werden für benachbarte Substitutionen (etwa -270 meV) und die höchsten für Fe(II)/Fe(III) und Al(III) als übernächste Nachbarn erreicht, im Gegensatz zu Pyrophyllit und Montmorillonit. Die Variationen des Redoxpotentials mit dem Abstand der betrachteten Substitutionen sind damit für alle untersuchten Smektite etwas größer als der Einfluss der Art der Verbrückung der Plätze bei festem Nachbarschaftsverhältnis (bis zu etwa 120 meV). Der Vergleich von Beidellit mit anderen Smektitmodellen zeigt, dass oktaedrische Mg(II)- und Fe(II)-Substitutionen die Reduktion benachbarten Eisens stärker erschweren als tetraedrische Al(III)-Substitutionen. Dies legt eine Abhängigkeit der Reduzierbarkeit von der Ladungsverteilung zwischen Oktaeder- und Tetraederschicht nahe.

Mit der Modellierung von Eisen und seiner Reduktion in Beidellit sind Arbeiten zu cis-vakanten Smektiten, bis auf die Überprüfung einzelner Daten und die weitere Untersuchung der metastabilen Konfiguration von Fe(II), abgeschlossen und werden als nächsten auf trans-vakante Strukturen erweitert.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP 1: Modelle und Methoden; AP 2: Fe(II) in Smektiten

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine

Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer: Leibniz Universität Hannover, Welfengarten 1, 30167 Hannover		Förderkennzeichen: 02 E 11870E
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren II – Phase II (UMB II), Teilprojekt E		
Zuordnung zum FuE-Programm: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte, Feld: 2.3		
Laufzeit des Vorhabens: 01.01.2021 bis 31.12.2023	Berichtszeitraum: 01.01.2023 bis 30.06.2023	
Gesamtkosten des Vorhabens: 228.860,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Renz	

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

AP1: Mößbauerspektroskopische Messungen und Auswertungen von Bentonitmaterialien zur Aufklärung des Fe(II)/Fe(III) Verhältnisses aus den Versuchen der anderen Projektteilnehmer (Speziation)

AP2: Analytischer Beitrag zur Korrosionsratenbestimmung an der Eisen-Bentonit-Grenzfläche.

AP3: Optimierung der Methoden in der Mößbauerspektroskopie zur Verbesserung der Messergebnisse.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP1 & AP2: Es wurden zusätzliche Analysen für weitere Projektteilnehmer durchgeführt. Neben der Auswertung einer zuvor angesetzten Testreihe wurden Mischungen mit Referenzmaterialien zur Validierung der Messmethode analysiert. Dabei handelte es sich um Gemische aus unreaktiertem Fe(0) sowie Tonmineralien mit definiertem Fe₂O₃-Anteil. Die Analysen dienten insgesamt dazu, die Grenzen der verwendeten spektroskopischen Messmethode zu evaluieren.
- AP3: Weiterentwicklung der Verstärkerschaltung der Detektoransteuerung & -auslesung. Ziel: Erstellung mehrerer Schaltungen in LT-Spice und MATLAB zur simulativen Erweiterung der Schaltung.
 Erste Schaltung: Transimpedanzverstärkerschaltung erzielt simulativ gute Ergebnisse und ist bereit in Hardware umgesetzt zu werden. Simulative Schaltungsanalyse einschließlich Stabilitätsbetrachtung und Filtererweiterung erfolgt und zeigt gute Ergebnisse auf.
 Prototypenentwicklung der TIA-Schaltung fast abgeschlossen, bisher gefertigte Teile geben gute Signalgüte an. Sensorelement wird noch geplant.
 Erste Software-Erweiterungen der Ausleseeinheit sind erfolgt. Weitere Module der Ausleseeinheit werden bearbeitet. Mehrere Detektoren sind auslesbar. Zweidimensionale Datenauslesung in Teilmodulen bereits erfolgt. Weitere Module folgen.

4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1 & AP2: Es sollen weitere Mößbauermessungen für die BGR, das HZDR sowie die Universität Greifwald aufgenommen und ausgewertet werden. Die Probleme mit dem Tieftemperaufbau sollen behoben werden, sodass genauere Messungen ermöglicht werden.
- AP3: Die Detektorelektronik sowie die Auswerteeinheit werden weiter optimiert. Letzte Einheiten der Transimpedanzverstärkerschaltung werden in Hardware umgesetzt und weitere Messungen folgen. Die entwickelte Simulation wird um einen Zustandsregler und Zustandsbeobachter erweitert und sowohl simulativ als auch in emulierter Form getestet und eingesetzt. Dies dient der Rauschreduktion in der Datenvorverarbeitung der Signale. Außerdem erfolgt somit eine Anpassung der elektronischen Bauteile der Mößbauer Spektroskopie an aktuelle Bauteilproduktionen. Etliche vorher verwendete Bauteile werden nicht mehr hergestellt und müssen aktualisiert werden. Aus diesem Grund muss eine Neuentwicklung der Verstärkerplatine erfolgen. Des Weiteren wird die Software der Auswerteeinheit optimiert, um eine schnellere Detektion einzelner Photonenereignisse zu erlauben und somit höhere Countraten zu ermöglichen. Die Signalvorverarbeitung spielt an dieser Stelle eine entscheidende Rolle. Zusätzlich soll das Konzept der zweidimensionalen Datenaufnahme weiter ausgebaut und auf mehrere Detektoren ausgeweitet werden.

5. Berichte, Veröffentlichungen

"TWO-DIMENSIONAL MÖSSBAUER SPECTROMETER BASED ON ARDUINO TECHNOLOGY", *Moritz Jahns, Justus Pawlak, Stephen Klimke, Ralf Sindelar, Ulrich Schrewe, Robert Patzke, Franz Renz*, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A, 1031(2022).

Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer: Institut für Bodenkunde, Leibniz Universität Hannover		Förderkennzeichen: 02 E 11870F
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt F		
Zuordnung zum FuE-Programm: Förderkonzept des Bundesministeriums für Wirtschaft und Energie (BMWi): Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle		
Laufzeit des Vorhabens: 01.01.2021 bis 31.12.2023	Berichtszeitraum: 01.01.2023 bis 30.06.2023	
Gesamtkosten des Vorhabens: 254.261,00 EUR	Projektleiter: PD Dr. Stefan Dultz	

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

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

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1: Für die quantitative mikrotomographische Untersuchung von Mineralumwandlungen und Gasentstehung in Bentoniten durch die Oxidation von Fe(II) enthaltender Minerale wurden Messtermine am DESY in Hamburg vom 4.-7. Juli 2023 erhalten. Vorversuche wurden unter Zusatz verschiedener Konzentrationen des Oxidationsmittels H₂O₂ durchgeführt, um in den zeitlich eng begrenzten *in situ* Versuchen ausreichenden Umsatz der beteiligten Mineralphasen zu erreichen. Der Messaufbau wurde hinsichtlich der Infiltrationsgeschwindigkeit der H₂O₂-Lösung in die Tonprobe angepasst. Analysen einzelner tomographischer Lagen der Hydrothermalversuche von 0-8000 h am Ton SD-80 zeigten einen relativ schnellen Umsatz der Fe(II)-haltigen Schwerminerale, nicht aber der Carbonate an. Möglicherweise werden in den unter Druck durchgeführten Hydrothermalversuchen die entstandenen Protonen weniger durch Carbonate sondern

durch Austausch von Neutralkationen neutralisiert. Der initiale Druckaufbau in den Hydrothermalversuchen im Zeitraum bis 120 h wurde für fünf Tone vergleichend untersucht. Dabei wurde allein für den Ton B37 ein über die anderen Tone (B19, B25, GMZ-001 und SD-80) und den Blank hinausgehender Druckaufbau festgestellt. Die Messung am Gaschromatographen ergab, dass der festgestellte Druckaufbau bei der Probe B37 nicht auf CO₂ zurückzuführen ist. Nach Diskussion mit S. Kaufhold kann aufgrund von massenspektroskopischen Untersuchungen naheliegend gemacht werden, dass dieser durch SO₂ bedingt ist.

AP2: Das für Versauerungsreaktionen wirksame Fe(II) wurde nach Dichtefraktionierung bei 2,9 g cm⁻³ separat für Leichtminerale (hauptsächlich Tonminerale) sowie Schwerminerale bestimmt. Dabei ist für die fünf untersuchten Tone der Fe(II)-Gehalt in der Schwermineralfraktion gegenüber der leichten Fraktion deutlich erhöht (3,7-8,8 bzw. 0,1-1,17 %). Da die Schwermineralfraktion in den untersuchten Tönen einen Anteil von unter 0,7 % hat, liegen auch in der leichten Fraktion deutliche Mengen an Fe(II) vor, die versauerungswirksam werden können.

AP3: Keine Arbeiten im Berichtszeitraum.

AP4: Von HZDR wurden weitere Metallplättchen aus mikrobiellen Exponierungsversuchen zur Kennzeichnung des Korrosionsfortschrittes über die Quantifizierung der Oberflächenrauheit erhalten. Die Untersuchungen bei vier verschiedenen Aufbereitungsformen der Oberfläche bestätigen das bisherige Bild: Nach einem Tag Exposition nimmt die Rauigkeit zunächst ab um dann höchste Werte bei der 70°C Behandlung, längster Exposition von 350 Tagen zu erreichen. Für die Quantifizierung des Korrosionsumsatzes der Fe-Plättchen wurden die sekundär gebildeten Oxide des Fe, Mn und Si sowie Al mit Hilfe der Dithionit-Citrat-Bicarbonat (DCB)-Methode aus den umgebenden Tönen in den Exponierungsversuchen extrahiert und die freigesetzten Elementmengen am ICP-OES quantifiziert. Für diese drei Elemente wurden sehr ähnliche Muster bei den extrahierten Mengen erhalten (im Gegensatz zu Al, dass überwiegend aus Tonmineralen freigesetzt wird), die die selektive Erfassung der neu gebildeten oxidischen Korrosionsprodukte naheliegend machen. Damit ist das Verfahren eine wichtige Ergänzung zu der bisher am HZDR durchgeführten Extraktion mit HCl.

AP5: Nach Extraktion der Tone nach der DCB-Methode wird zum Teil eine Erhöhung der Si-Freisetzung erhalten. Offensichtlich bedingt die Abfuhr von Fe, Al und Mn von den Oberflächen der Tonminerale und hier insbesondere von den Kantenflächen eine Destabilisierung/erhöhte Lösungsrate. Mit dieser Beobachtung kann die stabilisierende Wirkung des Vorhandenseins mehrwertiger Kationen an den Tonmineraloberflächen naheliegend gemacht werden. Aus Adsorptionsversuchen gelingt diese Beobachtung nur zum Teil. Zur Untersuchung der Beziehung zwischen chemischer Stabilität von Smektit und Belegung mit mehrwertigen Ionen wurden auch Pyrophyllit und Illit einbezogen, die an der TUM in der Modellierung betrachtet werden. Hier ergab sich eine Reihung nach der Schichtladung, Stabilität von Pyrophyllit > Smektit > Illit. In Diskussion mit S. Krüger wurden die Untersuchungsfragen konkretisiert.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP1: Auswertung der tomographischen *ex* und *in situ* Aufnahmen hinsichtlich Mineralumsatz und Gasentwicklung.

AP2: Untersuchung des Anionen- und Kationenumsatzes von Versauerungsreaktion durch Ionenchromatographie, Manuskripterstellung

AP4: Rauigkeitsuntersuchungen an Metallplättchen und DCB-Extraktion der Tone an weiterer Zeitstufe der HZDR Versuchsreihe.

AP5: Chemische und strukturelle Untersuchung der Kantenflächen mittels XPS

5. Berichte, Veröffentlichungen

Im diesem Berichtszeitraum wurden keine Publikationen veröffentlicht.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 11880
Vorhabensbezeichnung: Sicherheitsrelevante Untersuchungen zur Bentonitaufsättigung (SIRUB)		
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept des BMWi 2021 - 2025: FuE-Feld C2.3: Geotechnische und technische Barrieren		
Laufzeit des Vorhabens: 01.04.2021 bis 30.09.2025	Berichtszeitraum: 01.01.2023 bis 30.06.2023	
Gesamtkosten des Vorhabens: 1.356.372,00 EUR	Projektleiter: Dr. Klaus-Peter Kröhn	

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

Bei der Durchführung des Vorhabens werden folgende Arbeitspakete bearbeitet:

- AP 1: Vorbereitende Arbeiten
- AP 2: Aufsättigung am Bentonit-Wasser-Kontakt
- AP 3: Begrenzt freie Quellung
- AP 4: Einheitsisothermen
- AP 5: Endporosität nach der Aufsättigung über Dampf
- AP 6: Interaktion von Grundwasser und Bentonit im Kristallin
- AP 7: Erstellung des Abschlussberichts

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Zu AP1: Testaufnahmen und die nachfolgende Auswertung von Spektrometeraufnahmen waren erfolgreich, so dass ein solches Gerät nunmehr bestellt wurde und die Auslieferung unmittelbar bevorsteht.

Zu AP4: Die Messungen der Adsorptions- und Desorptionsisothermen an den verschiedenen Bentonitproben wurden abgeschlossen. Für die Auswertung wird eine Skalierung entsprechend des jeweiligen Montmorillonitgehalts und eine gewichtete Mittelung entsprechend der Kationenbelegung der Zwischenschichten vorgenommen. Während mit diesen Daten in den meisten Fällen eine plausible Annäherung erreicht werden konnte, gibt es jedoch auch ein paar wenige Fälle, in denen dies nicht befriedigende Ergebnisse erzeugt. Eine Ursache konnte noch nicht identifiziert werden.

Zu AP5: Die Aufsättigungsmessungen über Wasserdampf und mit flüssigem Wasser zur Bestimmung der Endporosität wurden fortgesetzt. Der Zustand voller Aufsättigung ist jedoch noch nicht erreicht.

Zu AP6: Die Untersuchungen mit Hilfe von Kluffdaten aus der Task Force haben erhebliche Probleme bei der Ausrichtung der oberen und unteren Klufffläche zueinander aufgezeigt. Daher sollen Kluffdaten für AP6 mit dem eigenen 3D-Scanner erhoben werden.

Auch aus diesem Grund wurde die Einladung von SKB zum Scannen von Kluffmaterial aus dem HRL Äspö angenommen und eine einwöchige Messkampagne durchgeführt. Nicht alle ausgewählten Granitproben konnten in dieser Zeit werden gescannt. Zwei weitere Granitproben sollen daher bei der GRS vermessen werden. Bereits jetzt liegen weltweit einzigartige Rohdaten zu einer Kluffkreuzung vor.

Das Messfeld des Scanners, das für die Überprüfung der Genauigkeit des 3D-Scanners sehr hochauflösend gewählt worden war, lieferte einerseits sehr detaillierte Geometriedaten, machte aber auch die Auswertung der Scans außergewöhnlich aufwändig. Offenkundig führt die detaillierte Aufnahme von Kluffoberflächen softwareseitig an die Grenze des Auswertbaren.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Inbetriebnahme des Spektrometers und Kalibrierung zur Bestimmung des Wassergehalts (AP1)
- Beginn der Aufsättigungsversuche (AP2 und AP3)
- Fortsetzung der Arbeiten zur Isothermenbestimmung aus Referenzisothermen (AP4)
- Fortsetzung der Aufsättigungsversuche über Dampf und Wasser (AP5)
- Scannen der übrigen Granitproben aus dem HRL Äspö (AP6)
- Design und Herstellung einer gedruckten Kluft mit selbst gescannten Oberflächendaten (AP6)

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine

Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer: BGE TECHNOLOGY GmbH		Förderkennzeichen: 02 E 11890A
Vorhabensbezeichnung: Entwicklung und Test eines erweiterten Hoek-Brown Stoffmodells zur Berücksichtigung anisotropem Festigkeitsverhaltens bei der Anwendung der Integritätskriterien für kristalline Wirtsgesteine (BARIK)		
Zuordnung zum FuE-Programm: F&E-Bereich 4: Sicherheitsnachweis F&E-Feld 4.1: Phänomene, Prozesse und Modelle, Entwicklung prozess-beschreibender Modelle und von process level codes (Skaleneinfluss - upscaling) sowie deren Qualifizierung. F&E-Feld 4.3: Weiterentwicklung und Aktualisierung der Methoden und Rechenprogramme für Langzeitsicherheitsanalysen.		
Laufzeit des Vorhabens: 01.03.2021 bis 31.10.2024	Berichtszeitraum: 01.01.2023 bis 30.06.2023	
Gesamtkosten des Vorhabens: 492.526,40 EUR	Projektleiter: R. Paola León Vargas	

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Das vorliegende Projekt zielt auf die Entwicklung und den Test eines erweiterten dreidimensionalen Hoek-Brown Stoffmodells ab, das in der Lage ist, anisotropes Festigkeitsverhalten speziell in einem mit mehreren Klüften durchzogenen Gebirgskörper zu berücksichtigen. Es geht darum, die Grenzbedingung so zu formulieren, dass die festigkeitsreduzierenden Eigenschaften des jeweiligen Kluftsystems im Zuge des Integritätsnachweises adäquat berücksichtigt werden können. Das neue Stoffmodell (BARIK-Stoffmodell) soll in zwei unterschiedliche Computercodes implementiert und getestet werden. Die Verwendung zweier Computercodes ermöglicht es, Ungenauigkeiten, die sich aus der Verwendung unterschiedlicher Codes ergeben, zu erkennen und zu bewerten. Mithilfe des BARIK-Stoffmodells soll geprüft werden, ob die aktuelle Formulierung und Quantifizierung des Dilatanz-Kriteriums im Falle kristalliner Wirtsgesteine ausreichend ist, oder ob Änderungen bzw. Konkretisierungen mit Blick auf die Berücksichtigung anisotroper Festigkeitsverhalten vorgenommen werden. Zur Berechnung des effektiven Spannungszustandes wird auch der Biot-Koeffizient als hydromechanischer Kopplungsparameter im geklüfteten Gestein herangezogen.

Die Durchführung des Projektes erfolgt in enger Zusammenarbeit mit der Technischen Universität Bergakademie Freiberg.

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

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

- AP 1: Entwicklung des erweiterten Stoffmodells
- AP 2: Laborversuche zur Eigenschaftsbestimmung
- AP 3: Implementierung und Test
- AP 4: Anwendung und Bewertung
- AP 5: Dokumentation

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im Berichtszeitraum wurden im Rahmen von Arbeitspaket 3 (AP3) signifikante Fortschritte erzielt. Die Validierungsrechnungen des Stoffmodellansatzes mit Hilfe von FLAC3D v7, basierend auf einem dreidimensionalen Modell einer Eingangsstrecke und vertikalen Bohrlöchern, wurden fortgesetzt. Als Vergleichsbasis dienten bereits in FLAC3D implementierte Stoffmodelle wie Ubiquitus-Joint und Hoek-Brown-PAC. Für diese Stoffmodelle wurden sorgfältig kalibrierte Referenzwerte erarbeitet.

Die Entwicklungsarbeit am BARIK-Stoffmodell für OpenGeoSys mithilfe von MFront wurde konsequent vorangetrieben. Dabei wurde das Skript auf die Version 4.01 aktualisiert. Neben der Implementierung des grundlegenden Hoek-Brown-Stoffmodells wurden in MFront sowohl die assoziierte als auch die nicht-assoziierte Fließregel berücksichtigt. Zur Darstellung der nicht linearen Fließgrenze wurde das Mohr-Coulomb-Kriterium verwendet. Ein wesentlicher Schritt in dieser Phase waren die Verifizierungsprozesse. Diese bestanden aus einaxialen Zug- und dreiaxialen Drucktests im Druckbereich zwischen 0,2 und 50 MPa.

Im Rahmen von AP5 wurden zwei Publikationen für das SafeND Symposium im September 2023 eingereicht. Beide Beiträge wurden akzeptiert und werden sowohl als Poster präsentiert. Ergänzende Arbeiten umfassten umfangreiche kommentierte Literatur-recherchen und die stetige Erweiterung der Dokumentation von Verifizierungs- und Validierungsrechnungen.

4. Geplante Weiterarbeiten

- AP 3: Integration der Schwächefläche in die erste verifizierte Stufe des BARIK-Stoffmodells mittels MFront für OpenGeoSys.
- AP 3: Einbindung der hydromechanischen Kopplung sowie der strain-softening-Funktionen in das BARIK-Stoffmodell.
- AP 3 und AP4: Fortführung der Validierungsberechnungen mit FLAC3D.
- AP 4: Erste Anwendungsanalysen des BARIK-Stoffmodells zur Überprüfung des Dilatanzkriteriums.
- AP 5: Detaillierte Dokumentation der Verifizierungs- und Validierungsrechnungen für das BARIK-Stoffmodell unter Verwendung von FLAC3D und OpenGeoSys.
- AP 5: Erstellung und Fertigstellung von Postern für das SafeND Symposium der BASE im September in Berlin.
- AP 5: Ausarbeitung einer Präsentation des Forschungsprojekts BARIK für das Projektstatus-Gespräch der PTKA im November in Karlsruhe.

5. Berichte, Veröffentlichungen

León Vargas, R. P.; Friedel, M.; Hassanzadegan, A.; Rahmig, M.; Weber, F.; Konietzky, H. (2023): BARIK, an extended Hoek–Brown-based anisotropic constitutive model for fractured crystalline rock. sand-2023-114. J. Ahlswede et al. (Hg.): Safety of Nuclear Waste Disposal. Interdisciplinary Research Symposium on the Safety of Nuclear Disposal Practices safeND BASE, vom 13.-15.09.2023 in Berlin. Copernicus (im Druck)

Friedel, M.; Weber, F.; Konietzky, H.; León Vargas, R. P.; Hassanzadegan, A.; Rahmig, M. (2023): BARIK: Laboratory program within the framework of the development of an Extended Hoek-Brown-Based Anisotropic Constitutive Model for Fractured. sand-2023-59. J. Ahlswede et al. (Hg.): Safety of Nuclear Waste Disposal. Interdisciplinary Research Symposium on the Safety of Nuclear Disposal Practices safeND BASE, vom 13.-15.09.2023 in Berlin. Copernicus (im Druck)

Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer: Technische Universität Bergakademie Freiberg		Förderkennzeichen: 02 E 11890B
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Entwicklung und Test eines erweiterten Hoek-Brown Stoffmodells zur Berücksichtigung anisotropen Festigkeitsverhaltens bei der Anwendung der Integritätskriterien für kristalline Wirtsgesteine (BARIK), Teilprojekt B		
Zuordnung zum FuE-Programm: Nukleare Entsorgung: siehe Förderkonzept 2015-2018 Nukleare Entsorgung: siehe Förderkonzept Grundlagenforschung Energie 2020+ FuE-Bereich 4: „Sicherheitsnachweis“, speziell die FuE-Felder 4.1 „Phänomene, Prozesse und Modelle“ als auch 4.3 „Systemanalysen und Werkzeuge der Sicherheitsanalysen“		
Laufzeit des Vorhabens: 01.03.2021 bis 31.10.2024	Berichtszeitraum: 01.01.2023 bis 30.06.2023	
Gesamtkosten des Vorhabens: 382.918,55 EUR	Projektleiter: Prof. Dr.-Ing. habil. Heinz Konietzky	

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

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

AP 1 – Entwicklung Stoffmodell:

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

AP 2 – Laborversuche:

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

AP 3 - Implementierung und Test:

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

AP 4 – Evaluierung:

- Evaluierung des Stoffgesetzes beim Einsatz als Dilatanzkriterium.

AP 5 – Dokumentation:

- Zwischenzeitliche und abschließende Dokumentation aller Entwicklungen und Arbeiten sowie Datensicherung.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Implementierung des ersten Schwächeflächensystems und Erweiterung des Stoffgesetz-Codes auf bis zu drei Schwächeflächensysteme, jeweils auf Basis des Ubiquitous-Joint-Ansatzes. Weiterentwicklung und Implementierung des Konzepts zur Ermittlung der elastischen Schwächeflächenparameter aus der komplexen orthotropen Elastizitätsmatrix des Gesteins. Verifizierung des Konzepts zur Bestimmung der elastischen Schwächeflächenparameter anhand von Testinitialisierungen, welche mehrere tausend Parameterkonstellationen berücksichtigen. Verifizierungsrechnungen zum Versagen eines Schwächeflächensystems bei isotrop-elastischer und transversal-isotrop-elastischer Gesteinsmatrix. Weitere Konzeptionierung der Verifizierungsrechnungen für das erweiterte BARIK-Modell mit Hoek-Brown-Versagen und eines Schwächeflächensystems.

Abschluss der rein mechanischen Triaxialversuche am Gneis sowie Anpassung der Versuchsplanung der hydraulisch-gekoppelten Triaxialversuche zur Charakterisierung der Permeabilität und Schädigung im Schädigungsprozess. Austausch mit der BGR zur Durchführung und Messung von relevanten Parametern während der hydraulischen Durchströmung zur Bestimmung des Dilatanzkriteriums. Beginn erster hydro-mechanisch gekoppelter Versuche.

4. Geplante Weiterarbeiten

Verifizierung des Schwächeflächenversagens im aktuellen BARIK-Stoffgesetz bei orthotroper Gesteinsmatrix. Implementierung eines Algorithmus zur Versagensabfrage/-entscheidung für die Durchführung der plastischen Korrektur entweder auf Basis eines Schwächeflächensystems oder der Matrix. Verifizierung dieses Abfragealgorithmus. Verifizierungsrechnungen des BARIK-Stoffgesetzes mit aktivierten Hoek-Brown- und Schwächeflächenversagen (isotrop und orthotrop). Dokumentation der Arbeiten zur Implementierung und Verifizierung der Schwächeflächensysteme.

Weiterführung des festgelegten Laborprogrammes am Freiburger Gneis respektive der hydraulisch gekoppelten Versuche (AP2).

5. Berichte, Veröffentlichungen

Friedel, M.; Weber, F.; Konietzky, H.; León Vargas, R. P.; Hassanzadegan, A.; Rahmig, M. (2023): BARIK: Laboratory program within the framework of the development of an Extended Hoek-Brown-Based Anisotropic Constitutive Model for Fractured. sand-2023-59. J. Ahlswede et al. (Hg.): Safety of Nuclear Waste Disposal. Interdisciplinary Research Symposium on the Safety of Nuclear Disposal Practices safeND BASE, vom 13.-15.09.2023 in Berlin. Copernicus (im Druck)

León Vargas, R. P.; Friedel, M.; Hassanzadegan, A.; Rahmig, M.; Weber, F.; Konietzky, H. (2023): BARIK, an extended Hoek–Brown-based anisotropic constitutive model for fractured crystalline rock. sand-2023-114. J. Ahlswede et al. (Hg.): Safety of Nuclear Waste Disposal. Interdisciplinary Research Symposium on the Safety of Nuclear Disposal Practices safeND BASE, vom 13.-15.09.2023 in Berlin. Copernicus (im Druck)

Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer: BGE TECHNOLOGY GmbH		Förderkennzeichen: 02 E 11900	
Vorhabensbezeichnung Langzeitsicherheit von Verschlussystemen in Schächten und Rampen im Vergleich (LARYSSA)			
Zuordnung zum FuE-Programm FuE-Feld C2.1 - Sicherheits- und Endlagerkonzepte FuE-Feld C2.3 - Geotechnische und technische Barrieren			
Laufzeit des Vorhabens: 01.06.2021 bis 31.07.2023		Berichtszeitraum: 01.01.2023 bis 30.06.2023	
Gesamtkosten des Vorhabens: 479.325,30 EUR		Projektleiter: Philipp Herold	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP 1 – Verschlusskonzepte
- AP 2 – Entwicklung einer Methodik zum Vergleich
- AP 3 – Nachweis des Verschlussvermögens
- AP 4 – Vergleich und Bewertung
- AP 5 – Berichtswesen

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP4: Die erarbeitete Methodik erlaubt die Bewertung von Verschlussystemen über die Indikatoren Dichtheit, bewertet durch das Verhältnis aus Durchströmzeit und Bemessungszeitraum, Rückhaltevermögen, der Kapazität Radionuklide zu binden und Robustheit, die über das Verhalten des Barriersystems gegen Schädigungen gebildet wird. Dichtheit und Rückhaltevermögen können dabei mit der Bewertung der Robustheit verknüpft werden. Im Berichtszeitraum wurde die Methodik auf Verschlussysteme angewendet. Als zielführend hat sich ein gestaffeltes Vorgehen etabliert. Begonnen wurde zunächst mit dem Indikator Dichtheit, kombiniert mit der Robustheit. Der Indikator Rückhaltevermögen wurde im Anschluss bewertet.

Grundlage für die Bewertung bilden (Schacht-)Verschlusskonzepte aus anderen FuE-Vorhaben und die in AP1 erarbeiteten weiteren Verschlusskonzepte für Rampen. Im Rahmen des Vergleiches wurden für jedes Verschlusskonzept durch die Variation der Länge und Durchlässigkeit der einzelnen Dichtelemente eine Vielzahl möglicher Konfigurationen berücksichtigt. Statt eines konkreten Verschlussaufbaus mit festgelegten Längen und Eigenschaften wird somit ein Parameterraum betrachtet. Es zeigt sich, dass eine Maximierung des hydraulischen Widerstandes nur noch zu kleinen Verbesserungen der Dichtheit führt. Aus der Abhängigkeit der Dichtheit von dem hydraulischen Widerstand und damit der Qualität und Menge des eingesetzten Dichtmaterials kann ein Optimum zwischen hydraulischem Widerstand und verbesserter Dichtheit gefunden und so einen Zielwert für den Indikator Dichtheit bestimmt werden. Mit Hilfe des Zielwerts lässt sich eine Konfiguration oberhalb erläuteter Vielzahl möglicher Konfigurationen für ein Verschlusskonzept auswählen. So kann Länge und geforderte Durchlässigkeit festgelegt bzw. optimiert werden. Die Konfigurationen des betrachteten Lösungsraumes werden zusätzlich für die Bewertung des Indikators Robustheit benutzt. Jede Konfiguration wird mit unterschiedlichen Schadensmodellen kombiniert. Die erwartete Ausfallhäufigkeit der Barriere ist ein Maß für die Robustheit. Zuletzt wird dann der Indikator Rückhaltefähigkeit bewertet. Hier kann ein entsprechender Rückhaltewert für die angenommenen geochemischen Bedingungen bestimmt werden. Jede betrachtete Konfiguration kann somit durch konkrete Zahlenwerte der drei Indikatoren belegt werden. Ein Vergleich untereinander oder zu anderen Verschlusskonzepten ist über den Vergleich dieser Zahlenwerte möglich.

Die Anwendung der Methodik zeigte, dass damit auch eine Optimierung von Verschlusskonzepten möglich ist. Schwächen der Methodik wurden in der Relevanz der Eingangsparameter und der Abhängigkeit der Festlegung der Parameter identifiziert. Die Bandbreiten z.B. der Längen müssen innerhalb des technisch machbaren liegen. Gleiches gilt für die verwendeten Schadensmodelle. Sowohl absolute als auch relative Schädigungen können berücksichtigt werden. Kenntnisse über die Herstellbarkeit der einzelnen Dichtelemente sollten bereits zu Beginn des Vergleiches vorliegen. Nach der Auswahl der Konfigurationen ist diese nochmal im Detail zu prüfen.

AP5: Die erarbeiteten Projektergebnisse wurden in einem zusammenfassenden Abschlussbericht dokumentiert.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP5: Die Arbeiten am Abschlussbericht werden bis zum Projektende (31.07.2023) fortgeführt und abgeschlossen.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Vortrag: Herold, P.; Burlaka, V.; Neuhaus, M.; Räuschel, H. (2023) How to compare different sealing concepts? US German Workshop on Salt Repository Research, Design, and Operation, Santa Fe (USA), 20.-22.06.2023

Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer: Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf (HZDR), Bautzner Landstr. 400, 01328 Dresden		Förderkennzeichen: 02 E 11911A
Vorhabensbezeichnung: Vorhersage der heterogenen Radionuklidsorption auf Kluft- und Störungsflächen in granitischen Gesteinen: Parametrisierung und Validierung verbesserter reaktiver Transportmodelle (WTZ-Granit), Teilprojekt A		
Zuordnung zum FuE-Programm: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle 1.2 Wissenschaftliche Grundlagen der Standortauswahl		
Laufzeit des Vorhabens: 01.04.2021 bis 30.11.2024	Berichtszeitraum: 01.01.2023 bis 30.06.2023	
Gesamtkosten des Vorhabens: 253.632,00 EUR	Projektleiter: Cornelius Fischer	

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

AP 1: Mineralogisch-geochemische und oberflächenanalytische Charakterisierung der Kluft- und Störungsoberflächen

AP 2: Heterogene Oberflächenreaktivität: Experimentelle und numerische Untersuchungen zur Sorptionseffizienz

AP 3: Parametrisierung und Validierung der reaktiven Transportmodelle, basierend auf experimenteller Analyse des Transportverhaltens und der Oberflächenreaktivität

AP 4: Nachwuchsförderung und internationaler Austausch

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Die Simulationsrechnungen, die auf den bisherigen numerischen Arbeiten zur Transportheterogenität auf Klufflächen im Granit von Soultz-sous-Forêts basieren, wurden im Berichtszeitraum weiter optimiert. Alle bisher in diesem Projekt verwendeten Kluffgeometriemodelle wurden genutzt, um die Oberflächenrauheit der unterschiedlich stark vereinfachten Modelle quantitativ zu unterscheiden. Eine systematische Analyse der Leistungsspektraldichte (power spectral density, PSD) der Rauheitsdaten aller Modellsysteme wurde durchgeführt. Insgesamt konnte mit diesem Ansatz eine Verbesserung der Prognose der Durchbruchkurven erreicht werden. Daraus leiten wir derzeit Hinweise für das Modelldesign bei den erwarteten Anwendungen der Transportmodelle ab.

Die Vergleiche der Ergebnisse von bei dem Projektpartner FSU Jena existierenden 2,5D- und hier erzielten 3D-Transportmodellierungen wurden damit abgeschlossen. Ein gemeinsames Manuskript dazu mit dem Projektpartner wurde weitgehend erstellt und steht vor dem Abschluss, eine diesbezügliche Posterpräsentation erfolgte auf der EGU2023.

Die Arbeiten für den nächsten Schritt, die Modellierung der Matrixdiffusion, wurden begonnen. Erste Tests an rasterelektronenmikroskopischen Bildern wurden durchgeführt, um eine Parametrisierung (Porosität, Porennetzwerkgeometrie) der Transportmodelle zu erzielen, basierend auf den Ergebnissen zur Gesteinsalteration in der Nachbarschaft der Klüfte (Granodiorit, Stbr. Königsbrück).

4. Geplante Weiterarbeiten

Die Auswertung der CT-Daten aus Olkiluoto wird fortgesetzt. Positronen-Emissions-Tomografie- (PET-)Messungen der Fließpfade auf Klüften wurden weiter verarbeitet und quantitativ ausgewertet. Simulationsrechnungen auf den Kluffgeometrien von Olkiluoto sind geplant und sollen mit den Durchbruchkurven von Soultz-sous-Forêts verglichen werden. Vergleiche der Transportmodellierungen mit den PET-Datensätzen bzgl. der hydrodynamischen Parameter sind geplant.

Konzeptionelle Abstimmungen zur Durchführung von Diffusionsexperimenten bei dem Projektpartner FSU Jena wurden durchgeführt, um experimentelle Daten zur Parametrisierung bzw. Validierung der Transportmodelle für die Matrixdiffusion zu erhalten. Experimente mit PET wurden geplant (Königsbrück) und an Vergleichsmaterial ausgewertet (u.a. Bukov), vgl. Vortragspräsentation auf der EGU2023.

5. Berichte, Veröffentlichungen

W Zhou, C Fischer (2023): 3D modeling of solute transport through natural fractures with microrough walls in crystalline host rocks: The effects of asperities and surface characteristics on hydrodynamics, EGU General Assembly, Vienna, 23-28 April 2023 (Posterbeitrag)

C Fischer, J Kulenkampff, M Cardenas-Rivera, W Zhou, J Schöngart (2023): Tomographic analysis of advective flow and diffusive flux toward improved migration predictability in host rocks for radioactive waste, EGU General Assembly, Vienna, 23-28 April 2023 (Vortrag)

Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer: Friedrich-Schiller-Universität Jena, Fürstengraben 1, 07743 Jena		Förderkennzeichen: 02 E 11911B
Vorhabensbezeichnung: Vorhersage der heterogenen Radionuklidsorption auf Kluft- und Störungsflächen in granitischen Gesteinen: Parametrisierung und Validierung verbesserter reaktiver Transportmodelle (WTZ-Granit), Teilprojekt B		
Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte, Feld: 2.3		
Laufzeit des Vorhabens: 01.04.2021 bis 30.11.2024	Berichtszeitraum: 01.01.2023 bis 30.06.2023	
Gesamtkosten des Vorhabens: 249.905,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Thorsten Schäfer	

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

AP 1: Mineralogisch-geochemische und oberflächenanalytische Charakterisierung der Kluft- und Störungsoberflächen

AP 2: Heterogene Oberflächenreaktivität: Experimentelle und numerische Untersuchungen zur Sorptionseffizienz

AP 3: Parametrisierung und Validierung der reaktiven Transportmodelle, basierend auf experimenteller Analyse des Transportverhaltens und der Oberflächenreaktivität

AP 4: Nachwuchsförderung und internationaler Austausch

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1: Die im Teilprojekt 02 E 11911B untersuchten Proben wurden um weitere Proben aus dem Oberottendorfer Zweiglimmer Granodiorit ergänzt. Der Kontakt zwischen Wirtsgestein und den mafischen Ganggesteinen stellt einerseits eine potentielle Wegsamkeit dar. Andererseits ist hier eine Veränderung der Sorptionseigenschaften zu erwarten. Zur Bestimmung der Sorptionskapazität in Batchexperimenten wurde eine Auswahl an Lamprophyren und Wirtsgesteinen aufgebrochen (1-2 mm) und aufgemahlen (<63 µm). Weiterhin stehen für die Bestimmung der orts aufgelösten Sorptionskapazität und -lokation polierte Dick- und Dünnschliffe zur Verfügung, welche den Kontakt zwischen Wirtsgestein und Lamprophyr abdecken.

AP2: Die Eluationsversuche des Lausitzer Granodiorits wurden abgeschlossen. Dabei wurde der pH-Wert der Gleichgewichts-ähnlichen Lösungen im alkalischen Bereich (pH 8-9) bestätigt. Auf Grundlage der chemischen Zusammensetzung dieser Eluate wurden neue Rezepte für den Hintergrundelektrolyt der Sorptionsexperimente zusammengestellt. Diese werden in den kommenden Monaten für Kurzzeit-Sorptionsversuche (bis 14 Tage) genutzt. Die gestarteten Kurzzeitversuche umfassen eine Auswahl an aufgemahlenen Proben (<63 µm) aus dem Lausitzer Granodiorit, Meißner Granit, Zweiglimmer-Granodiorit & Lamprophyren aus Oberottendorf, sowie Kluffüllungen. Gleichzeitig wird in Batchversuchen über mehrere Monate an frischen und alterierten Proben des Lausitzer Granodiorits (<63 µm und 1-2 mm) die Langzeitdynamik der Sorption (Matrixdiffusion) untersucht. Die orts aufgelöste Sorption wird anhand von Dünnschliffen und Gesteinsklötzchen mittel Laserablation-gekoppelter ICP-MS untersucht. Es wurden hierzu bereits empirisch die Ablationsparameter zur Methodenoptimierung bestimmt, um ideale Ablationskrater in der inhomogenen Matrix (Granit/Granodiorit/Lamprophyr) zu erzielen.

AP4: Durch die Teilnahme der Doktorandin Annemie Kusturica an der Veranstaltung „KERNthemen“ des BMBF am 3.-4. Mai 2023 wurde der wissenschaftliche Austausch mit Nachwuchswissenschaftlern und Seniorscientists im Bereich Entsorgungs-, Reaktorsicherheits- und Strahlenschutzforschung ermöglicht. Der Austausch der Doktoranden wurde intensiviert und monatliche Besprechungen zur Weiterentwicklung des Projekts durchgeführt. Am 27.6. wurde bei einem Projekttreffen aller Beteiligten das weitere Vorgehen abgestimmt.

4. Geplante Weiterarbeiten

Die geochemische Charakterisierung der Lamprophyre wird abgeschlossen. Die zeitlich aufgelösten Batch-Sorptionsexperimente werden an Lamprophyren und dem umgebenden Wirtsgestein aus dem Zweiglimmer-Granodiorit (Oberottendorf) wiederholt. Um die Lösungs- und Sorptionsprozesse zu quantifizieren, sollen zudem die spezifischen Oberflächen der Sorbenten bestimmt werden. Die orts aufgelöste Sorption soll mit LA-ICP-MS bestimmt werden. Die Untersuchung einzelner alterierter Feldspäte wird aktuell vorbereitet. Erste Ergebnisse des Verbundprojekts zum Einfluss von Alteration und Inhomogenitäten des Lausitzer Granodiorits auf Transportprozesse werden bei der MIGRATION 2023 Tagung in Nantes (Frankreich) vorgestellt.

5. Berichte, Veröffentlichungen

veröffentlicht:

Kusturica, A., van Laaten, N., Drake, H. and Schäfer, T. (2022) LA-ICP-MS analysis of trace and rare-earth element distribution in calcite fracture fillings from Forsmark, Simpevarp and Laxemar (Sweden). *Environmental Earth Sciences* 81, 371.

Pidchenko, I.N., Christensen, J.N., Kutzschbach, M., Ignatyev, K., Puigdomenech, I., Tullborg, E.-L., Roberts, N.M.W., Rasbury, E.T., Northrup, P., Tappero, R., Kvashnina, K.O., Schäfer, T., Suzuki, Y. and Drake, H. (2023) Deep anoxic aquifers could act as sinks for uranium through microbial-assisted mineral trapping. *Communications Earth & Environment* 4, 128.

Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer: Forschungszentrum Jülich GmbH, Institut für Energie- und Klimaforschung (IEK) – Nukleare Entsorgung und Reaktorsicherheit (IEK-6)		Förderkennzeichen: 02 E 11921A
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Untersuchungen zur SEParation von AMericiem aus hochradioaktiven Abfalllösungen (SEPAM), Teilprojekt A		
Zuordnung zum FuE-Programm: 7. Energieforschungsprogramm „Innovationen für die Energiewende“ - Themenfeld Entsorgungs- und Endlagerforschung „Untersuchungen zu alternativen Entsorgungsmethoden anstelle der direkten Endlagerung in einem Bergwerk“		
Laufzeit des Vorhabens: 01.04.2021 bis 30.09.2024	Berichtszeitraum: 01.01.2023 bis 30.06.2023	
Gesamtkosten des Vorhabens: 254.678,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Giuseppe Modolo	

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

Das Projekt wird in vier Arbeitspaketen bearbeitet:

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

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Arbeitspaket 1:

BTP-(COOH)₈, ein hydrophiler Komplexbildner, wurde als CHON-Alternative für SO₃-Ph-BTP in Verbindung mit TODGA als Extraktionsmittel getestet. Dabei wurde eine gute Selektivität für An(III) gegenüber Ln(III) gefunden. Die Abtrennfaktoren weisen im Vergleich etwas niedrigere Werte als SO₃-Ph-BTP auf. Dennoch ist es ein vielversprechendes Molekül, da durch die Abwesenheit von Schwefelatomen die Erzeugung von sekundären festen Abfällen vermieden wird. Zur weiteren Aufklärung der Koordinationschemie von BTP-(COOH)₈ wurden TRLFS-Messungen mit dreiwertigen Metallionen (Cm und Eu) in zwei Systemen (HNO₃ und HClO₄) durchgeführt.

Die TRLFS-Ergebnisse zeigen, dass in HClO₄ schrittweise [Cm(BTP-(COOH)₈)_x] (x=1-3) gebildet werden. Eu Komplexe konnten in HClO₄ nicht gemessen werden, da der Ligand eine zu starke Fluoreszenz zeigt. In HNO₃ bildet Cm zwei 1:2 Komplexe und einen 1:3-Komplex. Für Eu werden drei Spezies gebildet, mit schrittweiser Addition von je einem Molekül. Die verschiedenen 1:2 Spezies, die mit Cm in HNO₃ gefunden wurden, regen zu weiteren Experimenten in diesem Bereich an. Die Färbung des Liganden und der molekulare Aufbau erschweren die Messungen, so dass die Methode verbessert werden muss.

Zusätzlich wurden mit BTBP-(COOH)₈ und BTPPhen-(COOH)₈ zwei Analoga von BTP-(COOH)₈ getestet. Beide weisen eine geringe Löslichkeit in sauren Medien auf und sind für die Lösungsmittelextraktion nicht geeignet.

Die Extraktionsergebnisse für den Liganden (2-Amino-2-Oxoethoxy)-Essigsäure zeigten, dass in Kombination mit TODGA keine Änderung des Extraktionsverhaltens beobachtet werden kann. Das Molekül zeigt keine Ln(III) oder An(III) Extraktion, was die Prämisse der zugrundeliegenden theoretischen Arbeit widerlegt (Zhang, 2022 *Int. J. Quantum Chem.*).

Arbeitspaket 2:

Im Berichtszeitraum wurden keine Arbeiten durchgeführt.

Arbeitspaket 3:

Im Berichtszeitraum wurden keine Arbeiten durchgeführt.

Arbeitspaket 4:

Die Doktorandin hat an verschiedenen Projekttreffen teilgenommen und ihre neuesten Ergebnisse vorgestellt. Des Weiteren erfolgte die Teilnahme an der BMBF-Veranstaltung „KERNthemen 2023“. Die erste Publikation wurde veröffentlicht (s.u.).

4. Geplante Weiterarbeiten

Die Charakterisierung von BTP-(COOH)₈ wird mit der Bestimmung des pKa-Wertes und der Stabilitätskonstanten durch UV-Vis-Spektroskopie fortgesetzt, und es werden neue Methoden gefunden, um diesen Prozess fortzusetzen

5. Berichte, Veröffentlichungen

Diaz Gomez, L. J.; Wilden, A.; Schneider, D.; Papparigas, Z.; Modolo, G.; Gullo, M. C.; Huskens, J.; Verboom, W. Synthesis and evaluation of new modified diglycolamides with different stereochemistry for extraction of tri- and tetravalent metal ions. *New J. Chem.* **2023**, *47*, 10, 4619-4627. DOI:10.1039/D2NJ05663A.

Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer: Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT)		Förderkennzeichen: 02 E 11921B
Vorhabensbezeichnung: Untersuchungen zur SEParation von AMeridium aus hochradioaktiven Abfalllösungen (SEPAM) Teilprojekt B: Thermodynamische Daten und Spektroskopische Untersuchungen		
Zuordnung zum FuE-Programm: 7. Energieforschungsprogramm „Innovationen für die Energiewende“ – Themenfeld Entsorgungs- und Endlagerforschung „Untersuchungen zu alternativen Entsorgungsmethoden anstelle der direkten Endlagerung in einem Bergwerk“		
Laufzeit des Vorhabens: 01.04.2021 bis 30.09.2024	Berichtszeitraum: 01.01.2023 bis 30.06.2023	
Gesamtkosten des Vorhabens: 250.000,00 EUR	Projektleiter: Andreas Geist	

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

Arbeitspaket 1:

Grundlagen Koordinations- und Extraktionschemie

Arbeitspaket 2:

Prozessrelevante Optimierungen

Arbeitspaket 3:

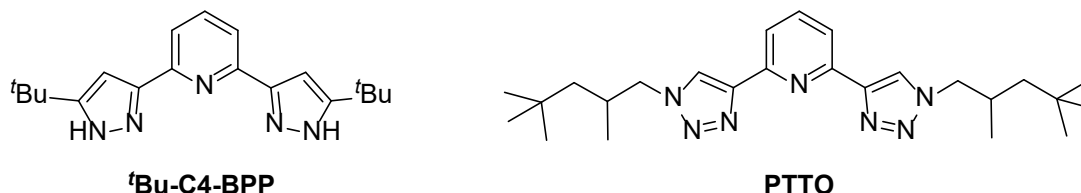
Modellierung und Prozesstests

Arbeitspaket 4:

Nachwuchsförderung

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Ziel ist es, den Einfluss der Anzahl und Position der Stickstoffatome im aromatischen Fünfring von N-Donor-Liganden auf die Komplexierung von dreiwertigen Actiniden und Lanthaniden zu bestimmen. Dazu wurde die Komplexierung von Cm(III) und Eu(III) mit Bis-Pyrazolyl-pyridinen (hier: C4-BPP) und Bis-1,2,3-Triazol-pyridinen (hier: PTTO) mittels TRLFS untersucht.



C4-BPP bildet mit Eu(III) in Methanol (+ 1,5 %_{vol.} H₂O) bereits bei einer C4-BPP-Konzentration von $1,0 \cdot 10^{-7}$ mol/L einen 1:1 Komplex ($^5D_0 \rightarrow ^7F_1$ 592.7 nm und $^5D_0 \rightarrow ^7F_2$ 617.2 nm). Ab $5,0 \cdot 10^{-5}$ mol/L ist die Bildung eines 1:2-Komplexes ($^5D_0 \rightarrow ^7F_1$ 591.7, 595.8 nm und $^5D_0 \rightarrow ^7F_2$ 617.5, 620.3 nm) beobachtbar. Für die Bildung dieser Spezies konnte keine signifikante Kinetik beobachtet werden. Die Existenz eines 1:3-Komplexes konnte nicht beobachtet werden. Die konditionalen Stabilitätskonstanten wurden zu $\beta_1' = 4,9 \pm 0,3$ und $\beta_2' = 8,0 \pm 0,5$ bestimmt. Der Unterschied zu den entsprechenden Cm(III)-Stabilitätskonstanten beträgt ca. 2,2 Größenordnungen, entsprechend einem Faktor 160. Dies ist in guter Übereinstimmung mit der in Extraktionsversuchen bestimmten Selektivität von $SF_{Am/Eu} \approx 200$.

In Untersuchungen von organischen Phasen aus Extraktionsexperimenten mit Cm(III) bzw. Eu(III) wurde die Bildung des Cm(III)-1:3-Komplexes bzw. des Eu(III)-1:2-Komplexes bestätigt. Weiterhin wurde die Komplexierung von Cm(III) mit PTTO in Methanol (+ 5 %_{vol.} H₂O + 0.01 mol/L HClO₄) untersucht. Der 1:1-Komplex (599.9 nm) und der 1:2-Komplex (605.6 nm) weisen bei $5,7 \cdot 10^{-6}$ mol/L bzw. $1,3 \cdot 10^{-5}$ mol/L PTTO ihren höchsten Anteil auf. Mit weiter zunehmender PTTO Konzentration bildet sich der 1:3-Komplex (608.3 nm). Oberhalb von $1,0 \cdot 10^{-4}$ mol/L PTTO wird keine weitere Veränderung der Emissionsspektren beobachtet. Folgende konditionalen Stabilitätskonstanten wurden bestimmt: $\beta_1' = 4,9$; $\beta_2' = 10,2$ und $\beta_3' = 15,1$. Die Fluoreszenzlebensdauer des 1:3-Komplexes von $562 \pm 28 \mu s$ deutet auf die Abwesenheit von Wasser in der ersten Koordinationssphäre, also das Vorliegen der Spezies $[Cm(PTTO)_3]^{3+}$, hin.

4. Geplante Weiterarbeiten

Arbeitspaket 1:

Die Untersuchung von PTTO mittels TRLFS wird vervollständigt. Dies beinhaltet u. a. die vollständige Untersuchung der Komplexierung von Eu(III) in Methanol (+ 5 %_{vol.} H₂O). Weiterhin werden NMR-Untersuchungen an BPP- und PTTO-Komplexen durchgeführt.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer: Rheinisch-Westfälische Technische Hochschule Aachen		Förderkennzeichen: 02 E 11931
Vorhabensbezeichnung: Einfluss der thermischen Reife auf die gekoppelten hydro-mechanischen Eigenschaften niedrig-durchlässiger Tonsteine – Feld & Laborskala (Maturity)		
Zuordnung zum FuE-Programm: Forschung zur nuklearen Sicherheit Bereich C1: Standortauswahl, Feld: 1:2		
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2021 bis 30.06.2025	Berichtszeitraum: 01.01.2023 bis 30.06.2023	
Gesamtkosten des Vorhabens: 1.299.689,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Florian Amann	

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Ziel des Projekts ist die Untersuchung der Abhängigkeit der petrophysikalischen und gesteinsmechanischen Eigenschaften von Tonsteinen von ihrer geologischen Versenkungsgeschichte, d. h. von der maximalen Versenkungstiefe, und den damit verbundenen, erheblichen Änderungen der maximal erreichten Drücke und Temperaturen. Dies ist erforderlich, um die Integrität potenzieller Tonsteinformationen im tiefen Untergrund und ihre Entwicklung über einen Zeitraum von 1 Million Jahren zu beurteilen. Gut geeignet für dieses Projekt sind die Tonsteine des Pliensbachiums (Unterjura), die in 8 Forschungsbohrungen entlang der Hilsmulde (ca. 50 km südlich von Hannover) in-situ vermessen und an Bohrkernen beprobt werden sollen. Das Areal zeichnet sich durch eine homogene Faziesverteilung mit stark variierender Absenkungs- und Temperaturgeschichte aus, was das Gebiet zu einem natürlichen Labor zur Untersuchung der Tonstein-Eigenschaften macht. Ein multidisziplinärer Ansatz aus Bohrlochgeophysik und geochemischen, petrophysikalischen und gesteinsmechanischen Laborexperimenten wird eingesetzt, um die entsprechenden Parameter und Prozesse zu untersuchen.

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

AP1: Planung und Ausführung der Bohrungen und Bohrlochausbauten
 AP2: Planung und Ausführung von hydraulischen in-situ Tests im ausgebauten Bohrloch
 AP3: Stratigraphie
 AP4: Laborversuche an Bohrkernen
 AP5: Synthese

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP 1 und AP2: Zum aktuellen Zeitpunkt wurden die Bohr- und Loggingarbeiten sowie die hydraulischen Tests an drei von fünf Lokationen erfolgreich abgeschlossen; an der vierten Lokation wurde die erste Bohrung erfolgreich abgeteuft; die zweite Bohrung findet dort gerade statt.

AP 3: Die Stratigraphie der abgeschlossenen Bohrungen wurde bestimmt und zeigt, dass der gewünschte Zielhorizont, das Pliensbachium, an allen vier Lokationen erfolgreich in der gewünschten thermischen Reife und in genügender Mächtigkeit angetroffen wurde.

AP 4: In Bezug auf die Laborarbeiten wurde die grundlegende geochemische Charakterisierung für die ersten drei Lokationen weitestgehend (1 m Auflösung) abgeschlossen. Die geochemische Charakterisierung für Lokation 2 (Mainzholzen) wurde zudem bereits komplett ausgewertet; dazu ist eine erste wissenschaftliche Publikation fertiggestellt worden, die gerade bei einer wissenschaftlichen Zeitschrift eingereicht wurde. Petrophysikalische und mineralogische Messungen (z.B. He-Pycnometrie, Röntgendiffraktometrie, Kationen-Austausch-Kapazität) wurden für alle bereits fertiggestellten Bohrungen weitestgehend (10 m Auflösung) abgeschlossen.

4. Geplante Weiterarbeiten

In den verbleibenden Monaten 2023 werden die restlichen Bohrarbeiten an der letzten verbleibenden Lokationen durchgeführt, was zum Abschluss von AP1 und AP2 bis Ende 2023 führen wird; im Idealfall bis Mitte Oktober. Parallel dazu werden die Laborversuche an den bereits vorliegenden Kernen fortgeführt. Bis Ende 2023 sollte die grundlegende stratigraphische, lithologische, geochemische, petrophysikalische und mineralogische Charakterisierung weitgehend abgeschlossen sein. Zudem wird erwartet, dass bis dahin auch erste detaillierte Daten zu Durchlässigkeiten und geomechanischen Eigenschaften vorliegen, so dass erste Korrelationen zwischen diesen Gesteinseigenschaften und der thermischen Reife herausgearbeitet werden können.

5. Berichte, Veröffentlichungen

- Jalali M., Grohmann S., Winhausen L., Erbacher J., Littke R., Amann F., 2022. MATURITY: The Effect of Thermal Maturity on the Coupled Hydro-Mechanical Properties of the Pliensbachian Low-Permeability Mudstones in the Lower Saxony Basin. Poster Präsentation auf den Tagen der Standortauswahl 2022.
- Burnaz L., Littke R., Erbacher J., Strauss H., Grohmann S., Amann F., submitted. Lower Jurassic (Pliensbachian-Toarcian) marine paleoenvironment in western Europe: Sedimentology, geochemistry and organic petrology of the wells Mainzholzen and Wickensen, Hils Syncline, Lower Saxony Basin. International Journal of Earth Sciences.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 11941
Vorhabensbezeichnung: Wissenschaftliche Grundlagen zum Nachweis der Langzeitsicherheit von Endlagern – WiGru-9		
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept des BMWi 2021 - 2025: FuE-Feld C3.2 Methodische Grundlagen der Nachweisführung und FuE-Feld D1.1 Methoden und Instrumente des Wissens- und Kompetenzmanagements. Relevant für alle Wirtsgesteine		
Laufzeit des Vorhabens: 01.05.2021 bis 30.09.2024	Berichtszeitraum: 01.01.2023 bis 30.06.2023	
Gesamtkosten des Vorhabens: 2.250.056,65 EUR	Projektleiter: Dr. U. Noseck	

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

TA 1: Bearbeitung grundlegender Aspekte

- Verfolgung und Bewertung internationaler Entwicklungen zu offenen Fragen und zur Weiterentwicklung von Strategien und methodischen Vorgehensweisen bei einem Safety Case inklusive Kommunikation und Wissenserhalt und Einbringung nationaler Interessen in internationale Aktivitäten, insbesondere durch Mitarbeit in internationalen Arbeitsgruppen der OECD/NEA.
- Diskussion von eigenen und externen Ergebnissen in nationalen Diskussionsforen zur Erarbeitung gemeinsamer Stellungnahmen und Vorgehensweisen zu ausgewählten Themen der Endlagerung in Deutschland.
- Auswertung neuer wissenschaftlicher Ergebnisse und Aufbereitung zur Verwendung in Instrumentarien für Langzeitsicherheitsanalysen.

TA 2: Bearbeitung von Schwerpunktthemen

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

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

TA 1: - Fertigstellung des Berichts der IGSC-Arbeitsgruppe TARGES und Initiierung von neuen Initiativen der IGSC zum Thema Anforderungs-Management und Update von Safety Case. Leitung der IGSC Core Group Treffen und des Programm-Komitees für das SC Symposium 2024 mit Durchführung von ersten Planungstreffen.
- Teilnahme an den Plenary Meetings der Arbeitsgruppen IDKM- in Paris und EGAR in Wick, sowie an dem EGAR-Arbeitstreffen in Prag und EGAR-Bureau Treffen. Koordinierung der Arbeiten zur Identifizierung essentieller Unterlagen für Konrad und Vorbereitung eines gemeinsamen Berichts zum Set of Essential Records.

- Fertigstellung des CRC Program of Work (PoW) 2023 – 2024; Teilnahme an drei Bureau Meetings, einem Treffen der deutschen Teilnehmer und einem Vorbereitungstreffen für das CRC-6 Meeting; Organisation und Durchführung des CRC-6 Plenary Meetings vom 13.-15.06.2023 in Korea, Topical Session zu geochemischen Bedingungen im Kristallingestein, Diskussion und Überarbeitung des Questionnaires für die CRC Mitglieder.
- Moderation des Workshops „Human Intrusion Scenarios in Salt Repositories“ im Rahmen des Salt Clubs (online am 10.01. und 11.01.2023) und Teilnahme am US-German Workshop in Santa Fe.

- TA 2:
- Fortsetzung der Analyse von komplexeren Modellsystemen verschiedener Länder im Rahmen der gemeinsamen Aktivität zur Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse (JOSA); Anwendung weiterer Methoden der Sensitivitätsanalyse und Interpretation von Ergebnissen; Abstimmung mit den Partnern in mehreren Video-Gesprächen. Weiterführung der Arbeiten zur Dokumentation Teil 2.
 - Weiterführung der Vergleichsrechnungen für ein Endlager im Salzgestein im internationalen Vorhaben DECOVALEX 2023, Task F. Diskussion und Interpretation von Ergebnissen der unterschiedlichen Institutionen in virtuellen Meetings. Teilnahme am 7. Workshop DECOVALEX D-2023 in Busan, Korea.
 - Teilnahme am Meeting der Task Force EBS im April in Berkeley. Die Arbeiten aus WiGru-7 zur Aufsättigung bei begrenztem Wasserangebot wurden als Task 14A angenommen.
 - Teilnahme an den Online-Seminaren der CatchNet-Gruppe.
 - Die Wiederholbarkeit der Einfrierversuche mit gedruckten Klüften erwies sich als problematisch. Möglicherweise spielt Supercooling dabei eine Rolle.
 - Ein numerisches Modell für die Grundwasserbewegung unter Permafrostbedingungen wurde in COMSOL realisiert und die Temperaturentwicklung unter einem größeren Gewässer bei beginnender Eiszeit simuliert. Es zeigte sich, dass die reine Wärmeleitung nicht ausreicht, um die Bildung von Taliki zu erklären. Die Ergebnisse wurden auf der InterPore 2023 in Edinburgh präsentiert.

4. Geplante Weiterarbeiten

- TA 1:
- Leitung der IGSC Core Group Treffen und der weiteren Treffen des Programmkomitees für das SC Symposium 2024. Leitung der jährlichen IGSC-Sitzung in Paris. Teilnahme an den neuen Arbeitsgruppen der IGSC.
 - Teilnahme an Sitzungen des EGAR-Bureaus, Teilnahme mit Vortrag am Workshop „The medium and the message: Challenges and solutions in selecting and preserving records of radioactive waste“ in Solna, Schweden.
 - Leitung eines Bureau Meetings (online) am 31.01.2023, Planung des CRC-6 Plenary Meetings im Mai 2023 in Korea, Weiterführung der Arbeiten gemäß PoW.
 - Finalisierung des CRC Questionnaires, Finalisierung des überarbeiteten Status Reports, Teilnahme an weiteren Bureau Meetings, Vorbereitung des CRC-7 Meetings 2024
- TA 2:
- Weiterführung der Analyse von Modellsystemen verschiedener Länder im Rahmen der gemeinsamen Aktivität zur Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse (JOSA). Fertigstellung der Dokumentation Teil 2.
 - Weiterführung von Vergleichsrechnungen für ein Endlager im Salzgestein im internationalen Vorhaben DECOVALEX 2023. Erstellung des Abschlussberichtes und Teilnahme an virtuellen Meetings und am 2. Symposium / 8. Workshop DECOVALEX D-2023 in Troyes/Frankreich.
 - Arbeiten an der Wiederholbarkeit von Einfriervorgängen.
 - Formulierung eines Berichtsentwurfs über die Beschreibung von Task 14A der Task Force on EBS.
 - Fortsetzung der Modellrechnungen zur Talikbildung.
 - Teilnahme am Jahresmeeting der CatchNet-Gruppe im September in Kopenhagen.

5. Berichte, Veröffentlichungen - Keine.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 11951A
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Kompaktion von Salzgrus für den sicheren Einschluss - Phase 2 (KOMPASS II), Teilprojekt A		
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept des BMWi 2021 - 2025: FuE-Bereich 2: „Sicherheits- und Endlagerkonzepte; Endlagertechnik und (geo-)technische Barrieren“ und dort insbesondere das FuE-Feld: 2.3 „Geotechnische und technische Barrieren“		
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2021 bis 30.06.2023	Berichtszeitraum: 01.01.2023 bis 30.06.2023	
Gesamtkosten des Vorhabens: 298.800,00 EUR	Projektleiter: Larissa Friedenber	

1. Vorhabenziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

AP 1: Experimentelle Untersuchungen

In (AP1.1) sollen die in Phase 1 getesteten Vorkompaktionsmethoden weiterentwickelt werden. Für die Langzeitsicherheit des Salzgrusversatzes ist die Kenntnis der Permeabilitäts-Porositätsbeziehung unabdingbar. Hierzu sind in (AP1.2) systematische Untersuchungen der hydraulischen Eigenschaften des kompaktierenden Salzgruses geplant. Diese werden teilweise parallel zu den in (AP 1.3) stattfindenden Langzeitkompaktionsversuchen stattfinden.

AP 2: Mikrostrukturelle Untersuchungen

Ziele der mikrostrukturellen Untersuchungen sind zum einen in (AP 2.1) der Vergleich der Kornstruktur von experimentell vorkompaktierten Probekörpern mit in-situ kompaktiertem Material und somit die Verifizierung der Vorkompaktionsmethoden, sowie in (AP 2.2) die Untersuchung von langfristig kompaktiertem Salzgrus. In (AP 2.3) soll zudem der Einfluss von Feuchtigkeit auf das Kompaktionsverhalten untersucht werden.

AP 3: Numerische Modellierung

Ein erstes Benchmarking von 3 Triaxialversuchen, zeigte außerdem, dass weiterhin Entwicklungsbedarf bei der modelltheoretischen Abbildung des Kompaktionsverhaltens besteht. Hierzu werden in (AP 3.1) zunächst Benchmarkrechnungen der Laborexperimente aus (AP 1.3) durchgeführt, wodurch die Möglichkeit der Abbildung des isolierten Parameters untersucht wird. Auf dieser Basis werden die Modelle in (AP 3.2) verbessert und optimiert. Zum Aufzeigen der in dem Projekt erreichten numerischen Fortschritte wird in (AP 3.3) ein Demonstrator simuliert. Mit der Definition von Anforderungen an die numerischen Modelle mit Blick auf die Langzeitsicherheit wird in (AP 3.4) eine Verknüpfung zur langzeitlichen Sicherheitsbetrachtung gezogen.

AP 4: Dokumentation und Synthese

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

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im Berichtszeitraum fanden zwei Projektmeetings statt. Das insgesamt 7te Projektmeeting wurde am 15.03.2023 bei der BGR in Hannover gehalten. Es wurden die aktuellen Arbeitsstände präsentiert, die Finalisierung der Arbeiten besprochen, über den Abschluss des Projekts diskutiert und über eine Weiterführung der Arbeiten gesprochen. Das letzte Projektmeeting fand am 20.06.2023 bei den amerikanischen Kollegen in Santa Fe statt. Hier wurde wieder der US/German Workshop genutzt, um ein internationales Präsenztreffen zu veranstalten. Es wurden erste Ergebnisse der Kollaboration mit dem SAVER Projekt vorgestellt, sowie Zwischenergebnisse eines Experiments des IfG bei dem eine Weiterführung wissenschaftlich interessant ist. Außerdem wurde der aktuelle Stand des Abschlussberichts, sowie dessen weitere Bearbeitung diskutiert. Neben den Projektmeetings fanden außerdem Zwischenmeetings in Expertengruppen statt. Die eine Gruppe befasst sich mit den Mikrostrukturuntersuchungen, die andere mit numerischer Modellierung. Die detaillierten Diskussionen in den Expertengruppen fördern das Vorankommen des Projekts.

Die GRS als Projektkoordinatorin ist für die Organisation der Meetings, die Koordination der Partner und auch die Erstellung des Abschlussberichts verantwortlich. Fachliche Arbeiten werden im GRS Labor mit Kompaktionsversuchen durchgeführt und es wird an der Verbesserung des numerischen Modells für Salzgruskompaktion gearbeitet.

Im Rahmen der Kooperation mit dem SAVER Projekt wurde Anfang des Berichtszeitraum der KOMPASS Versatzkörper fertiggestellt und die Setzungen seitdem gemessen.

4. Geplante Weiterarbeiten

-

5. Berichte, Veröffentlichungen

Friedenberg, L. (2023, June 22). *KOMPASS & MEASURES: A young story on crushed salt investigations*. BGE, PTKA, & Sandia National Laboratories. US/German Workshop. Salt Repository Research, Design, & Operation, Santa Fe.

Friedenberg, L., Czaikowski, O., Lerch, C., Müller-Hoeppe, N., Rahmig, M., Bartol, J., Düsterloh, U., Lerche, S., Saruulbayar, N., Laurich, B., Svensson, J. K., Zemke, K., Thiedau, J., Liu, W., Gartzke, A.-K., Popp, T., Lüdeling, C., Rölke, C., Rabbel, O., . . . van Oosterhout, B. (2023). Compaction of crushed salt for safe containment: Overview of Phase 2 of the KOMPASS project. In H. Huang, M. Hu, V. Varun, Z. Agioutantis, Y. Han, R. Wu, . . . J. Rutqvist (Chairs), *57th U.S. Rock Mechanics / Geomechanics Symposium*. Symposium conducted at the meeting of American Rock Mechanics Association, Atlanta.

Auftragnehmer: BGE TECHNOLOGY GmbH, Eschenstraße 55, 31224 Peine		Förderkennzeichen: 02 E 11951B	
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Kompaktion von Salzgrus für den sicheren Einschluss - Phase 2 (KOMPASS II), Teilprojekt B			
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept des BMWi 2021 - 2025: FuE-Bereich 2: „Sicherheits- und Endlagerkonzepte; Endlagertechnik und (geo-)technische Barrieren“ und dort insbesondere das FuE-Feld: 2.3 „Geotechnische und technische Barrieren“			
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2021 bis 30.06.2023		Berichtszeitraum: 01.01.2023 bis 30.06.2023	
Gesamtkosten des Vorhabens: 263.890,83 EUR		Projektleiter: Lerch	

1. Vorhabenziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

AP 1: Experimentelle Untersuchungen

Im Rahmen des Vorgängerprojekts KOMPASS-I wurden erfolgreich zwei Vorkompaktionsmethoden entwickelt, mit denen eine Herstellung von Probekörpern mit einer Porosität < 20 % in kurzer Zeit und unter in-situ relevanten Spannungsbedingungen möglich ist. In **(AP1.1)** sollen diese Vorkompaktionsmethoden weiterentwickelt werden und es wird angestrebt reproduzierbare und vorhersagbare Beziehungen zwischen Spannung, Zeitdauer, Feuchtegehalt des Salzgruses und Zielporosität herzustellen. Für die Langzeitsicherheit des Salzgrusversatzes ist die Kenntnis der Permeabilitäts-Porositätsbeziehung unabdingbar. Hierzu sind in **(AP1.2)** systematische Untersuchungen der hydraulischen Eigenschaften des kompaktierenden Salzgruses geplant. Diese werden teilweise parallel zu den in **(AP 1.3)** stattfindenden Langzeitkompaktionsversuchen stattfinden. Die langzeitlichen Versuche sind auf die isolierte Betrachtung einzelner das THM-gekoppelte Kompaktionsverhalten beeinflussender Faktoren ausgerichtet und folgen dem in KOMPASS-I entwickeltem Laborprogramm.

AP 2: Mikrostrukturelle Untersuchungen

Innerhalb von KOMPASS-I wurden mikrostrukturelle Methoden so weit vorangetrieben, dass eine Verknüpfung von Deformationsmechanismen und Kompaktion möglich ist. Ziele der mikrostrukturellen Untersuchungen sind zum einen in **(AP 2.1)** der Vergleich der Kornstruktur von experimentell vorkompaktierten Probekörpern mit in-situ kompaktiertem Material und somit die Verifizierung der Vorkompaktionsmethoden, sowie in **(AP 2.2)** die Untersuchung von langfristig kompaktiertem Salzgrus. In **(AP 2.3)** soll zudem der Einfluss von Feuchtigkeit auf das Kompaktionsverhalten untersucht werden.

AP 3: Numerische Modellierung

In KOMPASS-I wurde ein systematischer Vergleich von Stoffmodellen für die Beschreibung des Salzgrusverhaltens erstellt. Ein erstes Benchmarking von 3 Triaxialversuchen, zeigte außerdem, dass weiterhin Entwicklungsbedarf bei der modelltheoretischen Abbildung des Kompaktionsverhaltens besteht. Hierzu werden in **(AP 3.1)** zunächst Benchmarkberechnungen der Laborexperimente aus **(AP 1.3)** durchgeführt, wodurch die Möglichkeit der Abbildung des isolierten Parameters untersucht wird. Auf dieser Basis werden die Modelle in **(AP 3.2)** verbessert und optimiert. Zum Aufzeigen der in dem Projekt erreichten numerischen Fortschritte wird in **(AP 3.3)** ein Demonstrator simuliert, welcher eine generische mit Salzgrus verfüllte Strecke in einem Endlager im Steinsalz umfasst. Mit der Definition von Anforderungen an die numerischen Modelle mit Blick auf die Langzeitsicherheit wird in **(AP 3.4)** eine Verknüpfung zur langzeitlichen Sicherheitsbetrachtung gezogen.

AP 4: Dokumentation und Synthese

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

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im Berichtszeitraum wurde an zwei Projekttreffen sowie an einem weiteren mit auf die numerische Modellierung reduziertem Teilnehmerkreis teilgenommen.

Die BGE TEC-Arbeiten erfolgten in AP 3 und AP 4.

In AP 3.1 konnte die Optimierung durch die Kombination unterschiedlicher Strategien, einem globalen und einem lokalen Optimierungsverfahren, noch einmal verbessert werden. In der Anwendung auf TUC V2 zeigte sich, dass bereits der Modellansatz eines einzigen Prozesses in der Lage ist, das gemessene Verhalten zu beschreiben. Abweichungen traten in den hohen Temperaturzyklen auf. Auf einer breiteren Versuchsbasis muss geprüft werden, in wie weit eine modellbedingte Ursache für diese Abweichungen vorliegt. Allerdings ist bei einem reduzierten Ansatz, wie er in diesem Projekt zum Einsatz kam, die Extrapolationsfähigkeit bei abweichenden Randbedingungen eingeschränkt. Das kommt möglicherweise beim Versuch TUC V4 zum Tragen. Sowohl die Übertragung des Datensatzes aus TUC V2 auf V4 als auch eine gemeinsame Anpassung des Parametersatzes mit Hilfe beider Versuche führte auf deutliche Abweichungen.

Die Auswertung der Lastschleifen im TUC V2 zeigt insbesondere bei der Auswertung der axialen Komponenten, dass zwei Teilprozesse im Stoffmodell zu ergänzen sind: ein aus der Kataklase resultierender plastischer Prozess und ein bereits vom Steinsalzverhalten bekannte transiente Prozess der intrakristallinen Plastizität. Der transiente Prozess ist das Ergebnis des Ungleichgewichts von Versetzungsproduktion und Versetzungserholung. In TUC V2 lag der Schwerpunkt auf dem deviatorischen Verhalten; zwar wird ein vergleichbares Verhalten im isotropen Verhalten angenommen, eine entsprechende Auswertung des TUC V4 muss jedoch noch vorgenommen werden.

Mit den Parametern des TUC V2 konnten die Berechnungen am Demonstrator durchgeführt werden. Im Gegensatz zu dem begrenzten Porositätsbereich im Versuch wird durch die Rahmenbedingungen des Demonstrators ein wesentlich größerer Bereich abgedeckt. Trotz der erforderlichen Extrapolation zeigen die gewonnenen Ergebnisse eine gute Übereinstimmung mit den Projektpartnern. Untersuchungen zum Setzungsverhalten des granularen Salzes – Variante ohne Schwerkraft und Variante mit Kontaktelementen entlang Firste und Stoß im Vergleich zum Standardfall – konnten kein Setzungsverhalten des Verfüllkörpers aufzeigen.

Im AP 4 wurden die erzielten Ergebnisse zusammengefasst und als Bestandteile des Abschlussberichtes dokumentiert.

4. Geplante Weiterarbeiten

Keine, Projektende.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Das KOMPASS-II Projekt wurde auf dem 13. US-German-Workshop in mehreren Vorträgen in seiner gesamten Breite einschließlich der Zusammenarbeit mit dem Projekt SAVER vorgestellt. Die Vorträge werden in einem Gesamtbericht zum Workshop zusammengefasst werden. Darüber hinaus wurde das Projekt auf dem 57th US Rock Mechanics / Geomechanics Symposium in Atlanta präsentiert.

Auftragnehmer: Institut für Gebirgsmechanik GmbH, 02479 Leipzig		Förderkennzeichen: 02 E 11951C
Vorhabensbezeichnung: Kompaktion von Salzgrus für den sicheren Einschluss – Phase 2 (KOMPASS-II) Teilprojekt C		
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept des BMWi 2021 - 2025: FuE-Bereich 2: „Sicherheits- und Endlagerkonzepte; Endlagertechnik und (geo-)technische Barrieren“ und dort insbesondere das FuE-Feld: 2.3 „Geotechnische und technische Barrieren“		
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2021 bis 30.06.2023	Berichtszeitraum: 01.01.2023 bis 30.06.2023	
Gesamtkosten des Vorhabens: 286.215,20 EUR	Projektleiter: Dr. Till Popp	

1. Vorhabenziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

Das Arbeitsprogramm gliedert sich in insgesamt in vier Arbeitspakete:

AP1: Experimentelle Untersuchungen

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

AP2: Mikrostrukturelle Untersuchungen

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

AP3: Numerische Modellierung

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

AP 4: Dokumentation und Synthese

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

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im Berichtszeitraum (1. Halbjahr 2023) führten die Projektpartner neben mehreren Spezial-Abstimmungen der Modellierer-Gruppe zwei allgemeine Projekttreffen in Präsenz durch: 7th Meeting: 15.03.2023 bei der BGR Hannover, 8th Meeting: 19.06.2023 in Santa Fe, USA).

In AP 1 wurde nach Beendigung von GV4 (wet – Restporosität wenige %) ein weiterer Kompaktionsversuch (GV5 – wet) an befeuchtetem Salzgrus (ca. 1 wt.-% H₂O) in der großen Versatzdruckzelle gestartet. Hierbei wurden erstmalig zusätzlich Druckkissen im Salzgrus orientiert eingebaut, mit denen zusätzlich Spannungswerte zum Lastabtrag in der Zelle gewonnen werden sollten. Insgesamt wurden vier Laststufen (s_{1-max} : ca. 1 MPa; 5,0 MPa, 10,0 MPa und 20,0 MPa realisiert (in den ersten 3 Laststufen je 1 Woche Belastungszeit). Während der noch laufenden Belastungsphase von > 80 Tagen in der höchsten Stufe wurde ein stationärer Verformungszustand in Richtung einer Restporosität von wenigen % erreicht, wobei gleichzeitig kontinuierlich Lösung ausgepresst wurde. Allerdings gibt es deutliche Unterschiede in den Spannungs- und Verformungskurven der bisherigen Versuche, die zurzeit analysiert werden.

Die Durchführung von Langzeitversuchen in der großen Versatzdruckzelle mit zusätzlicher Instrumentierung (u.a. Druckkissen, Feuchtesensoren) eröffnet die Option zuverlässigere Informationen zur Fluidmigration / Lösungsspeicherung im Salzgrus und zur Homogenität der stattfindenden Kompaktion zur erhalten. Dies stellt einen Schwerpunkt in einem möglichen Folgevorhaben dar.

Für das AP 3 „Numerische Modellierungen“ führte das IfG im Berichtszeitraum die abschließenden Berechnungen mit dem virtuellen Demonstrator durch. Zusätzlich wurden von allen Partnern aktualisierte Simulationsdatensätze an das IfG geschickt, das eine vergleichende Analyse durchführte. Abschließend wurden sowohl die Arbeitsergebnisse des IfG als auch die Ergebnisse des virtuellen Demonstrators für den Abschlussbericht dokumentiert.

Die neuesten Simulationsrechnungen des IfG untersuchten den Effekt der verbesserten Parameteranpassung (an den Langzeitkompaktionsversuch TUC-V2) des Salzgrus-Stoffmodells auf die zeitabhängige Salzgruskompaktion im virtuellen Demonstrator. Im Ergebnis zeigte sich, dass durch die verbesserte Anpassung eine deutliche Annäherung der zuvor noch stark streuenden Kompaktionskurven der Partner erreicht werden konnte. Dies gilt insbesondere für den Bereich der niedrigen Porositäten (< 10%), in dem die Streuung der Kompaktionsraten von zuvor über zwei auf weniger als eine Größenordnung reduziert werden konnte. Die verbesserte Kalibrierung kann insofern als erfolgreich bezeichnet werden. Allerdings wurde auch festgestellt, dass im Bereich höherer Porositäten (>20%) die Modelle noch sehr unterschiedliche Ergebnisse liefern. Zudem können einige wichtige Einflussfaktoren (deviatorische Spannung, Temperatur, Feuchtigkeit) weiterhin nicht ausreichend kalibriert werden, da die entsprechende experimentelle Datenbasis noch geschaffen werden muss. Die weitere Verbesserung der Stoffmodellkalibrierung stellt somit ein Ziel für das Folgeprojekt dar.

Für den Abschlussbericht übernahm das IfG den Großteil der Darstellung der Ergebnisse des virtuellen Demonstrators und deren Beitrag zur Verbesserung des Forschungsstandes im Bereich Salzgrusmodellierung.

4. Geplante Weiterarbeiten

Fortsetzung des noch laufenden Kompaktionsversuchs in der großen IfG-Versatzdruckzelle (AP 1); Zuarbeit zum Abschlussbericht (AP 4).

5. Berichte, Veröffentlichungen

keine

Auftragnehmer: TU Clausthal - Lehrstuhl für Geomechanik und multiphysikalische Systeme		Förderkennzeichen: 02 E 11951D
Vorhabensbezeichnung: Kompaktion von Salzgrus für den sicheren Einschluss – Phase 2 (KOMPASS-II)		
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept des BMWi 2021 - 2025: FuE-Bereich 2: „Sicherheits- und Endlagerkonzepte; Endlagertechnik und (geo-)technische Barrieren“ und dort insbesondere das FuE-Feld: 2.3 „Geotechnische und technische Barrieren“		
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2021 bis 30.06.2023	Berichtszeitraum: 01.01.2023 bis 30.06.2023	
Gesamtkosten des Vorhabens: 307.503,00 EUR	Projektleiter: apl. Prof. Dr.-Ing. habil. Uwe Düsterloh	

1. Vorhabenziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

AP 1 Experimentelle Untersuchungen

- AP1.1 Weiterentwicklung der Vorkompaktionstechniken
- AP1.2 Demonstration der hydraulischen Integrität
- AP1.3 Durchführung von Langzeit-Kompaktionsversuchen

AP 2 Mikrostrukturelle Untersuchungen

- AP2.1 Verifizierung von Vorkompaktionsmethoden
- AP2.2 Bewertung von langzeitkompaktierten Proben
- AP2.3 Einfluss der Feuchtigkeit auf das Verformungsverhalten
- AP2.4 Bewertung von Proben aus Permeabilitätsmessungen

AP 3 Numerische Modellierung

- AP3.1 Benchmark-Berechnungen auf Basis der Laborexperimente
- AP3.2 Modellentwicklung und - Optimierung
- AP3.3 Demonstrator
- AP3.4 Bewertung der numerischen Modelle in Bezug auf die Anforderungen in der Langzeitsicherheitsanalyse

AP 4 Dokumentation und Synthese

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP 1 Experimentelle Untersuchungen

AP1.1 Weiterentwicklung der Vorkompaktionstechniken

- Systematische Untersuchungsreihen – Versuchsserie mit Variation des Feuchtegehaltes bei gleichbleibenden Belastungsbedingungen.

AP1.2 Demonstration der hydraulischen Integrität

- Auswertung der drei neu durchgeführten Versuche zum Permeabilitätsverhalten der langzeitkompaktierten Proben TK-033 und TK-031 von BGR sowie des Prüfkörpers TUC-V2.

AP1.3 Durchführung von Langzeit-Kompaktionsversuchen

- Durchführung der Vorversuche zur Überprüfung und Ertüchtigung der Anlagenmesstechnik für die Messung der Kompaktion für einen Salzgrusprüfkörper mit hoher Anfangsporosität.

AP 3 Numerische Modellierung

AP3.2 Modellentwicklung und – Optimierung

- Vergleichende Analyse der Berechnungsergebnisse der Verbundpartner für die Backanalyse des 5-Phasen-Langzeitkompaktionsversuchs TUC-V2 (750 d) im Hinblick auf eine Bewertung der Plausibilität der Ergebnisse sowie der Funktionalität der angewendeten Materialmodelle.

AP3.3 Demonstrator

- Rechnerische Simulation einer mit Salzgrus verfüllten Strecke mit dem basierend auf Versuch TUC-V2 ermittelten Parametersatz für das KOMPASS-Material für das Stoffmodell EXPO-COM.

AP3.4 Bewertung der numerischen Modelle in Bezug auf die Anforderungen in der Langzeitsicherheitsanalyse

-

AP 4 Dokumentation und Synthese

- Abschlussbericht für KOMPASS II.

5. Berichte, Veröffentlichungen

- LERCHE S., DÜSTERLOH U.: Laboratory investigations on crushed salt by TUC and modeling benchmark results in KOMPASS II, presentation for US/German Workshop, Santa Fe, Juni 20-23, 2023.
- Abschlussbericht für KOMPASS II (in Arbeit).

Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer: Technische Universität Bergakademie Freiberg, Akademiestr. 6, 09599 Freiberg		Förderkennzeichen: 02 E 11961
Vorhabensbezeichnung: Entwicklung eines salzgrusbasierten Versatzkonzeptes unter der Option Rückholbarkeit – Phase 1 (SAVER)		
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerkonzepte und Endlagertechnik		
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2021 bis 31.10.2023	Berichtszeitraum: 01.01.2023 bis 31.06.2023	
Gesamtkosten des Vorhabens: 554.503,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr.-Ing. Mischo	

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

Im GESAV II-Vorhaben wurde als optimale Einbautechnologie für die patentierte Rezeptur die Einbringung mit Lader und anschließender Verdichtung mit Rüttelplatte und Zuschleudern des Firstspaltes entwickelt. Im SAVER-Projekt (aktuell Phase 1) soll nun die Anwendbarkeit des Verfahrens sowohl auf GESAV als auch auf KOMPASS (Salzgrus)-Material weiter untersucht und die Parameter durch entsprechende Messeinrichtungen aufgenommen werden. Zusätzlich erhöht eine eingebaute POLLUX-Behälter-Attrappe die Realitätsnähe der In-Situ-Versuche.

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

AP1	Versuchskonzeption
AP1.1	Messkonzept für ein Langzeitmonitoring
AP1.2	Vorbereitung der großtechnischen Realisierung in der Grube Sondershausen
AP1.3	Entwicklung einer geeigneten Behälterattrappe
AP2	Geochemie
AP2.1	Qualitätssicherungssystem für die Ausgangsmaterialien
AP2.2	Verbesserung der Rezeptur des GESAV-Materials hinsichtlich einer möglichen geringeren Restfeuchte
AP3	Untertageversuche
AP3.1	Versatzkörper aus angefeuchteten Salzgrus (Referenzmaterial zu Vorhaben KOMPASS)
AP3.2	Versatzkörper aus verbessertem GESAV-Material

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1: Abgeschlossen (siehe vergangene Halbjahresberichte)

AP2: Parallel zu den untertägig ausgelesenen Daten werden im ca. 4-wöchigen Abstand Befahrungen der Versuchsorte durchgeführt, um Proben aus den Versatzkörpern zu entnehmen. Diese Proben werden geochemisch untersucht, um den Phasenbestand sowie die Entwicklung des Polyhalits nachvollziehen zu können. Der Beginn der Polyhalitbildung konnte bereits nachgewiesen werden. Der Abschluss der Polyhalitbildung sollte gegen Ende des Jahres erfolgt sein.

AP3: Die Errichtung beider Versatzkörper wurde im Februar 2023 abgeschlossen. Die dabei gewonnen In-Situ-Proben haben ergeben, dass beim GESAV-Material eine Einbaudichte von $1,5 \text{ g/cm}^3$ erreicht wurde und beim KOMPASS-Material $1,62 \text{ g/cm}^3$. Zwar wurde beim KOMPASS-Material eine höhere Einbaudichte erreicht, jedoch ist das Setzungspotential des Materials weitaus höher. Dies wurde durch die Setzungssonden festgehalten.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP1: Keine Weiterarbeiten nötig.

AP2: Die Versatzkörper werden nach Herstellung weiterhin kontinuierlich in regelmäßigen Abständen beprobt und geochemisch analysiert.

AP3: Keine Weiterarbeiten nötig. Die Daten der installierten Sensoren und Sonden werden weiterhin in regelmäßigen Abständen ausgelesen und ausgewertet.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Vorstellung SAVER-Projekte auf KOMPASS-II-Kick-Off

Vorstellung SAVER-Projekt bei US/German Workshop

Präsentation über Stand der Zusammenarbeit von SAVER und KOMPASS auf KOMPASS-II-Workshop

Präsentation über SAVER-KOMPASS-Kollaboration auf US-German-Workshop in Braunschweig

Vorstellung des SAVER-Projektes auf der SDIMI in Windhoek (Namibia)

Präsentation zur SAVER-KOMPASS-Kooperation auf KOMPASS-Workshop in Santa Fe, USA

Präsentation zum SAVER-Projekt auf US-German-Workshop in Santa Fe, USA

Zuwendungsempfänger: Technische Universität Bergakademie Freiberg, Akademiestr. 6, 09599 Freiberg	Förderkennzeichen: 02 E 11971A
Vorhabensbezeichnung: Anwendbarkeit von Niedertemperatur-Salzschmelzen für Verschlussmaßnahmen von Endlagern für radioaktive Abfälle im Wirtsgestein Salz (SalVE), Teilprojekt A	
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Endlagerforschung Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte; Endlagertechnik und (geo-)technische Barrieren; Felder C2.2 und C2.3	
Laufzeit des Vorhabens: 01.08.2021 bis 31.01.2024	Berichtszeitraum: 01.01.2023 bis 30.06.2023
Gesamtkosten des Vorhabens: 457.118,00 EUR	Projektleiter: Dr. Daniela Freyer

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP1: Erarbeiten der Anforderungen und Randbedingungen

AP2: Datenzusammenstellung, Literatursichtung relevanter Salzschmelzensysteme

AP3: Präzisierung der geologisch/technologischen und thermischen Randbedingungen für die vorausgewählten Endlagerkonzepte im Steinsalz

AP4: Auswahl in Frage kommender Salzschmelzen für die identifizierten Randbedingungen

AP5: Überprüfung der Einsatzfähigkeit von Salzschmelzen unter den Bedingungen eines Endlagerbergwerkes

AP6: Handhabungsversuche an positiv befundenen Salzschmelzen

AP7: Ableitung von Empfehlungen zur Anwendbarkeit ausgewählter Salzschmelzen in einem HAW Endlagerbergwerk und zur Durchführung weiterer Forschungsarbeiten

AP8: Dokumentation und Berichterstattung

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

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1: Entwicklung eines Grobkonzepts zur geotechnischen Nachweisführung für den modellbasierten Beleg der Funktionsfähigkeit (IfG) in Abstimmung mit dem Verbundpartner BGE TECHNOLOGY.

AP6: Mit der NaCl-AlCl₃-Schmelze wurden Aufgießversuche auf vortemperierten Salzgrus (25 °C, 40 °C, 100 °C, 160 °C und 200 °C) durchgeführt, wobei sich zeigte, dass eine Salzgrus-Temperatur oberhalb des Schmelzpunktes (> 155 °C) des NaCl-AlCl₃-Gemischs zu einem signifikant besseren Eindringen der Schmelze führt.

Die Feuchteempfindlichkeit der erstarrten NaCl-AlCl₃-Schmelze und damit einhergehende Umwandlung von NaAlCl₄ in NaCl und AlCl₃·6 H₂O wurde mittels PXRD aufgezeigt. Die damit verbundene Volumenausdehnung des Materials wurde sowohl in Kontakt mit Lösungen (Wasser und gesättigte NaCl-Lösung) als auch Luftfeuchte beobachtet. REM-Aufnahmen frisch erstarrter NaCl-AlCl₃-Schmelze zeigen eine deutliche Rissbildung und erklären die vergleichsweise hohe Gaspermeabilität des Materials im Vergleich zu kompaktem Steinsalz.

Anströmversuche mit gesättigter NaCl-Lösung führten zu einer Reduzierung der Permeabilität. Die Umbildungsreaktion unter Volumenzunahme war anhand von Kristallit-Bildung im Lösungskontaktbereich nach Ausbau des Probekörpers erkennbar. Ein Lösungsdurchtritt wurde nicht erreicht.

Die Wechselwirkung von heißer NaCl-AlCl₃-Schmelze mit Magnesiabaustoff der Rezeptur A1 wurde mit Aufgießversuchen der Schmelze auf Baustoffprobekörper getestet. Dabei zeigte sich ein zügiges Erstarren der Schmelze, welche nicht am Baustoff anhaftete. Im Kontaktbereich konnte die Umwandlung von NaAlCl₄ in NaCl und AlCl₃·6 H₂O mittels PXRD festgestellt werden, was durch Feuchte aus der oberflächlichen Dehydratation der Sorelphase (thermisch stabil im geschlossenen System bis 170°C) verursacht wurde.

Andere Schmelzsysteme (als NaCl-AlCl₃) aus dem Bereich der Niedertemperatur-schmelzen lassen sich nach Abschluss von AP2 nicht als geeignet für eine Anwendung für Verschlusskomponenten in einem Endlager in Steinsalz einordnen. Es werden daher keine Handhabungsversuche an anderen Schmelzsystemen mehr durchgeführt.

AP8: Die Strukturierung des Abschlussberichts wurde unter den Projektpartnern abgestimmt.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP1: Formulierung des Verbesserungspotentials durch den Einsatz von Salzschnmelzen an den identifizierten Lokationen in einem Endlager gegenüber anderen Materialien.

AP3: Szenarienableitung zur Temperaturentwicklung am Einsatzort und zu thermo-mechanischen Einwirkungen auf Verfüllbereiche sowie an Kontaktbereichen Schmelze/Salz/Abschlusspfropfen (IfG)

AP5: Konkretisierung der Ideenskizze zur Einbringung von Salzschnmelzen in Schacht- und Streckenverschlüssen (IfG) in Zusammenarbeit mit der BGE TECHNOLOGY

AP6: Präparation weiterer NaAlCl₄-Probekörper mit Steinsalzgrus für Haftzugversuche. Ein weiterer Aufgießversuch in größerem Maßstab (mehrere Liter Schmelze) steht zur Diskussion, um ggf. Eigenschaften und Hinweise für technische Umsetzungen zu erhalten.

AP8: Berichtserstellung

5. Berichte, Veröffentlichungen

Es gab keine Veröffentlichungen im Berichtszeitraum.

Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer: BGE TECHNOLOGY GmbH, Eschenstr. 55, 31224 Peine		Förderkennzeichen: 02 E 11971B	
Vorhabensbezeichnung: Verbundvorhaben: Anwendbarkeit von Niedertemperatur-Salzschmelzen für Verschlussmaßnahmen von Endlagern für radioaktive Abfälle im Wirtsgestein Salz (SalVE), Teilprojekt B			
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerforschung Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte; Endlagertechnik und (geo-)technische Barrieren; Felder C2.2 und C2.3			
Laufzeit des Vorhabens: 01.08.2021 bis 31.01.2024		Berichtszeitraum: 01.01.2023 bis 30.06.2023	
Gesamtkosten des Vorhabens: 119.416,50 EUR		Projektleiter: Dr. Andreas Keller	

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

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

Die Arbeitspakete 1, 3, 4, 5, 7 und 8 werden gemeinschaftlich bearbeitet, AP2 und AP6 nur auf der Seite des Verbundpartners.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im Berichtszeitraum erfolgten zwei Projektgespräche.

AP5: Anpassung des Einbringkonzeptes. Auf Basis der Rezepturänderung von einem vollständig flüssigen SSS zu einem Salzgrus der mit diesem SSS qualifiziert wird, verkleinert sich der Bedarf an Salzschnmelze. Die Bedarfsverkleinerung wird durch eine Kürzung der Abdichtlängen noch verstärkt. Demgegenüber steigen die Anforderungen an die Einbringtechnik, da eine vollständige Mischung von Salzgrus und Salzschnmelze nötig wird. Diese wird entweder durch Zwangsmischung oder durch lagenweises Einbringen des Salzgruses und Befüllen des Porenraumes erreicht. Aufgrund der stark zunehmenden Viskosität bei der Temperaturabsenkung sind die Lagenstärke bzw. die Körnung des Salzgruses in Abhängigkeit von der Temperatur der Salzschnmelzen bei der Verarbeitung festzulegen.

Die zyklische Herstellung von Salzschnmelze sollte bei der Befüllung möglichst in einen gleichmäßigen Strom überführt werden, um Trennfugen allgemein vorzubeugen. Bisherige Versuche mit flüssigem Natrium-Aluminiumchlorid zeigen jedoch, dass eine Schichtung bereits bei einem einzelnen Befüllvorgang entstehen kann, wenn durch ungleichmäßiges Fließen temporäre Oberflächen entstehen, die zu einem späteren Zeitpunkt nochmals überflossen werden. Ursache dafür ist die zügige Reaktion mit der Luftfeuchtigkeit. Daher scheint es zwingend notwendig die Luftfeuchtigkeit an der Befüllstelle zu begrenzen und ein Nachströmen von Luft auszuschließen.

Rückholbarkeit: Berücksichtigung der Aufwältigung von Salzschnmelzenbereichen. Gemäß StandAG und EndSiAnfV endet die mögliche Rückholung der Abfälle mit dem Verschluss des Endlagers. Dieser Zeitpunkt kann z.B. mit der Erstellung der Verschlussbauwerke zwischen Einlagerungs- und Infrastrukturbereich definiert werden. Genau diese und die später erstellten Schachtabdichtungen sollen aber mit einem SSS verbessert werden. Eine Öffnung der Verschlüsse ist daher nur im Rahmen einer Bergung möglich. Hierbei zeigt sich aufgrund der sicherheitstechnischen Anforderungen an den Baustoff, dass bevorzugt ein ferngesteuerter Abbau bzw. Vollschutz für das Personal genutzt werden sollte. Hinzu kommt die Absaugung der Wetter am Entstehungsort und die Reinigung dieser Luft. Um einen Kontakt des Personals mit dem salzschnmelzehaltigen Haufwerk auszuschließen, sollte das gebrochene Material ebenfalls nur in geschlossenen Behältern transportiert werden.

AP8: Die bisher erstellten Inhalte wurden der neuen Gliederung zugeordnet.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP5: Beschreibung von Maßnahmen zur Sicherung der Qualität des Bauwerksabschnittes mit Salzschnmelze.

AP7: Zusammenführung der Erkenntnisse und Gegenüberstellung der Anforderungen. Ableitung von Empfehlungen zur Eignung und zu weitergehender Forschung.

AP8: Berichterstellung

5. Berichte, Veröffentlichungen

-

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 11981A
Vorhabensbezeichnung: Implementierung eines Monitoringsystems zur Evaluierung der Korrosionsvorgänge an Behältermaterialien in Bentonit-basierten Endlagerkonzepten (IMKORB), Teilprojekt A		
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept des BMWi 2015 - 2018: FuE-Bereich C Endlagerforschung, C3 Sicherheitsnachweis, C3.1 Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-)Phänomene und Prozesse zugeordnet (siehe BMWi-Forschungsförderung zur nuklearen Sicherheit, 2021-2025).		
Laufzeit des Vorhabens: 01.08.2021 bis 31.07.2024	Berichtszeitraum: 01.01.2023 bis 30.06.2023	
Gesamtkosten des Vorhabens: 813.471,50 EUR	Projektleiter: PD Dr. habil. Andrés G. Muñoz	

1. Vorhabenziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

Ein möglichst umfassendes Verständnis der metallischen Korrosion von diversen degradationsbeständigen und für den Endlagerbehälter infrage kommenden Materialien soll entwickelt werden. Dabei werden möglichst realitätsnahe Temperatur-, Druck- und chemische Bedingungen berücksichtigt, wie sie im Nahfeld eines Endlagers für wärmeentwickelnde radioaktive Abfälle im Tongestein zu erwarten sind.

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

Im Einzelnen werden folgende Teilziele verfolgt

- AP 1 Entwicklung der elektrochemischen Sensorik zur Anwendung in In-Situ-Experimenten.
- AP 1.1 Elektrochemische Untersuchungen der Korrosion an der Metall-Porenwasser Grenzfläche.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Elektrochemische Untersuchungen (AP 1.1)

Korrosionsexperimente in gesättigtem Bentonit: Die geplanten Langzeitkorrosionsexperimenten von GGG40 bei 30°C und 50°C in der sogenannten Bentonit-Zelle wurden vollständig durchgeführt. Der Korrosionsverlauf wurde mittels in regelmäßigen Abständen durchgeführten Impedanzspektroskopie, Korrosionspotentialmessungen und Polarisationskurven verfolgt. Damit werden ersten Stadien der Korrosionsprozesse nach Eindringen des Porenwassers an die Grenzfläche Stahl-Bentonit in Anwesenheit von dem in den Bentonit-Poren eingeschlossenen Sauerstoff nachgeahmt. Die Morphologie und die chemische Zusammensetzung der korrodierten Oberfläche wurde nach den jeweils 6-monatlichen Experimenten mittels SEM-EDX, TEM-EDX und lokalisierten XPS untersucht.

Die Ergebnisse zeigen das Erreichen einer konstanten Korrosionsgeschwindigkeit nach 30 Tagen. Die Polarisationskurven zeigen eine Stromoszillation in dem kathodischen Zweig, die im Prinzip zu der durch das Bentonit gestörte Diffusion von gelöstem Sauerstoff verursacht wird. Den Mittelwert wurde erstmal zur Berechnung der Korrosionsgeschwindigkeit von den Polarisationskurven angenommen. Dieses Phänomen wird weiter in begleitenden Experimenten mittels Chronoamperometrie untersucht.

Die morphologischen und chemischen Oberflächenanalyse zeigen eine differenzierte Auflösung der unterschiedlichen Stahlphasen mit Bildung von schlecht passivierenden Eisenkorrosionsprodukten wie etwa Magnetit und vor allem von Eisensilikaten. Die Korrosionsgeschwindigkeit ist grundsätzlich durch die kathodische Sauerstoffreduktion kontrolliert. Lokale galvanische Elemente bilden sich an den Graphitkugel-Ferrit-Kontakte, die deren beschleunigten Auflösung verursachen.

Die geplanten Langzeitexperimente im gesättigtem Bentonit mit CuNi-Legierungen wurden angesichts von Undichtigkeiten zwischen den Experiment- und Wasserbad-Kompartiments abgebrochen. Diese werden demnächst mithilfe der neuen Bentonit-Zelle vervollständigt.

Aufbau einer neuen Bentonit-Zelle: Eine Bentonit-Zelle nach einem verbesserten Entwurf wurde bereits aufgebaut und montiert. Diese Zelle verfügt über einer an der Decke fixierten perforierten schiebbaren Platte, die einer besseren Kontrolle der Bentonit-Verdichtung ermöglicht. Das leichtere Einbauen der Proben und das kleinere Volumen der Zelle erleichtern die Handhabung während des Experiments. Außerdem kann man anoxische Bedingungen im Bentonit in einer kürzeren Zeit erreichen.

Sensorik: Die Antwort von den eingesetzten Pt-basierten Sensoren war von den dielektrischen Eigenschaften des Bentonits dominiert. Dies liegt grundsätzlich an der Platzierung des Sensors um ca. 5 mm Entfernung von der korrodierenden Fläche. Das neue Zellendesign sieht eine bessere Erfassung der Oberflächenchemie durch eine bessere Positionierung einer Ir-Elektrode mit einer größeren Fläche voraus.

Organisierung und Präsentation der Ergebnisse auf der 3. Projekttreffen am 19. Januar 2023 am UWTH der Leibniz-Universität Hannover.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Inbetriebnahme des vor kurzem angeschafften elektrochemischen Rasterelektronenmikroskops.
- Auswertung der Langzeitexperimente der Korrosion von CuNi30Mn1Fe (2.0882)-Legierungen in gesättigtem Bentonit bei 50°C.
- Verfeinerung einiger Polarisationsexperimente mit Blick auf ihre Veröffentlichung.
- Auswertung der Oberflächenanalyse ausgewählter Proben (SEM-EDX, TEM-EDX und XPS-Spektren)
- Publikation der ersten Ergebnisse zu Korrosion von GGG40 in Porenwasser
- 4. Projekttreffen: Ort der Veranstaltung ist noch nicht entschieden.

5. Berichte, Veröffentlichungen

First Stages of the Corrosion of Spheroidal Graphite Cast Iron in Oversaturated Wyoming Bentonite: an Electrochemical and Surface Chemistry Study, A.G. Muñoz, D. Schild. 2nd Annual ConCorD-Meeting (EURAD), Madrid, May 2023.

Corrosion mechanism of spheroidal graphite cast iron GGG40 in saturated Wyoming bentonite, A.G. Muñoz, D. Schild, EUROCORR 2023, Brussels, August 2023.

Corrosion processes at the GGG40 steel-bentonite interface, A.G. Muñoz, D. Schild, Interdisciplinary Research Symposium on the Safety of Nuclear Disposal Practices - safeND BASE, Berlin, September 2023.

Graphite Cast Iron GGG40 for Disposal Containers: The Corrosion Mechanism in Opalinus Clay Water, A.G. Muñoz, D. Schild, 244th Meeting of The Electrochemical Society, Gothenburg, Sweden, October 2023.

Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer: Karlsruher Institut für Technologie (KIT) Institut für Nukleare Entsorgung (INE)		Förderkennzeichen: 02 E 11981B
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Implementierung eines Monitoringsystems zur Evaluierung der Korrosionsvorgänge an Behältermaterialien in Bentonit-basierten Endlagerkonzepten (IMKORB), Teilprojekt B.		
Zuordnung zum FuE-Programm: Das Vorhaben ist dem FuE-Bereich C Endlagerforschung, C3 Sicherheitsnachweis, C3.1 Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-)Phänomene und Prozesse zugeordnet.		
Laufzeit des Vorhabens: 01.08.2021 bis 31.07.2024	Berichtszeitraum: 01.01.2023 bis 30.06.2023	
Gesamtkosten des Vorhabens: 459.413,62 EUR	Projektleiter: Dr. Finck	

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

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

AP 3: Laboruntersuchungen der Korrosion von Stahlcoupons in Bentonit

AP 4: In-situ Korrosionsexperimente von Stahlcoupons in Bentonit im Untertagelabor in Grimsel

AP 6: Dokumentation und Publikation

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

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

AP 3: Die Korrosionsexperimente unter statischen Bedingungen bei Raumtemperatur (RT) und 50°C mit 6 Monaten Reaktionszeit wurden beendet. Nach Abkühlung der Experimente auf RT wurden pH und Redoxpotentiale in-situ gemessen und die Zusammensetzung des Grundwassers nach Zentrifugation bestimmt. In Experimenten mit Feinkornbaustahl bei RT nimmt der in-situ gemessene pH-Werte von 8.4 (nach 3 Monaten) auf pH 7.7 (nach 6 Monaten) ab. Das Redoxpotential nimmt ebenso von -375 mV bis -495 mV (vs. S.H.E.) ab. Die Abnahme der Korrosionsrate von 2.8 $\mu\text{m/a}$ auf 1.9 $\mu\text{m/a}$ bei RT deutet auf die Bildung einer Schutzschicht hin. Der pH, das Redoxpotential und die Korrosionsrate für den zweiten untersuchten Werkstoff zeigen einen ähnlichen Trend. Für beide Werkstoffe wurde eine neue Serie mit 9 Monaten Reaktionszeit unter ähnlichen Randbedingungen angesetzt. Korrosionsexperimente unter dynamischen Bedingungen bei RT und 50°C mit 3 Monaten Reaktionszeit wurden ebenso vorbereitet.

In den elektrochemischen Untersuchungen wurden Stahlproben unter anoxischen Bedingungen bei RT in Bentonitsuspension bis zu 56 Tage lang korrodiert. Impedanzspektroskopie wurde nach verschiedenen Reaktionszeiten angewendet. Für den Feinkornbaustahl nimmt die Korrosionsrate mit der Reaktionszeit zuerst zu, bevor die Rate sich stabilisiert. Dagegen bleibt die Rate für den Federstahl über den untersuchten Zeitraum hinweg relativ konstant.

AP 4: In AP 4 wurden im Berichtszeitraum keine experimentellen Arbeiten durchgeführt. Die eingesetzten Coupons korrodieren weiterhin in Kontakt mit Bentonit in einem speziellen Bohrloch, welches im Rahmen des internationalen MaCoTe Experiments im Untertagelabor Grimsel (CH) verwendet wird.

AP 6: Keine Arbeiten innerhalb des Berichtszeitraums.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP 3: Die Charakterisierung der Coupons aus Experimenten unter statischen Bedingungen mit 6 Monaten Reaktionszeit bei 50°C soll abgeschlossen werden. Die Proben aus den Experimenten unter dynamischen Bedingungen mit 3 Monaten Reaktionszeit sollen charakterisiert werden. Eine neue Serie mit 6 Monaten Reaktionszeit soll unter ähnlichen Randbedingungen vorbereitet und angesetzt werden.

Die elektrochemischen Experimente sollen wiederholt werden um die Reproduzierbarkeit der Daten sicherzustellen, und die Coupons mit XPS analysiert werden. Elektrochemische Experimente mit einer anderen Bentonitsuspension sind geplant um einen möglichen Einfluss der Zusammensetzung des Bentonits auf die Korrosionsprozesse zu identifizieren.

AP 4: Fortsetzung der wissenschaftlich/technischen Koordinierung hinsichtlich der Arbeiten von KIT-INE im Rahmen des MaCoTe Experiments im Untertagelabor Grimsel (CH).

AP 6: Ein Manuskriptentwurf über die Experimente in Autoklaven soll erstellt werden.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Es gibt von KIT-INE aktuell noch keine Berichte oder Veröffentlichungen zu diesem Projekt.

Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer: Leibniz Universität Hannover		Förderkennzeichen: 02 E11981C	
Vorhabensbezeichnung: Verbundvorhaben: Implementierung eines Monitoringsystems zur Evaluierung der Korrosionsvorgänge an Behältermaterialien in Bentonitbasierten Endlager-Konzepten (IMKORB), Teilprojekt C			
Zuordnung zum FuE-Programm: Nukleare Entsorgungsforschung			
Laufzeit des Vorhabens: 01.08.2021 bis 31.07.2024		Berichtszeitraum: 01.01.2023 bis 30.06.2023	
Gesamtkosten des Vorhabens: 588.972,74 EUR		Projektleiter: Herr Dr.-Ing. Thomas Hassel	

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

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

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

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

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Nachdem in 2022 die metallographischen Untersuchungen zur Materialcharakterisierung zu einem großen Teil durchgeführt wurden, wurden im ersten Halbjahr 2023 die Untersuchungen auf eine feinere Charakterisierung im Hinblick auf die Korrosionseigenschaften ausgeweitet. Die ursprüngliche weitere Charakterisierung mittels EBSD konnte aufgrund fehlender Mittel noch nicht durchgeführt werden. Für die metallographische Charakterisierung wurden Probencoupons geviertelt und jeweils drei dieser Stücke in unterschiedlichen Orientierungen eingebettet und präpariert. Für einen Überblick über die Korrosionsraten der Werkstoffe, wurde jeweils eine dieser Proben im zweiten Halbjahr 2022 mit einem EC-Pen einem schnellen Korrosionsversuch unterzogen. Um genauere Ergebnisse über das Werkstoffverhalten zu bekommen, sollten diese Versuche ausgeweitet werden und Messungen in allen Werkstückorientierungen erfolgen. Diese Untersuchungen lassen sich nur schwierig an den eingebetteten Proben durchführen. Daher wurde das letzte Viertelsegment der zuvor zertrennten Probencoupons hierfür verwendet. Im Vorfeld der Probentrennung wurden die einzelnen Schnittrufer markiert, sodass eine Zuordnung der Probenflächen zu den Schliffbildern möglich ist. Zur Aufnahme der Proben in einem bereits vorhandenen Versuchsstand wurde eine neue Maske aus PTFE konstruiert, mit der bei jeder Probe eine identische Fläche dem korrosiven Angriff ausgesetzt ist. Der Durchmesser der Angriffsfläche beträgt bei der Maske 3,5 mm. Die Dichtung erfolgt direkt zwischen Probe und Maske. Eine zuverlässige Probenkontaktierung ist auf der Probenrückseite ebenfalls gewährleistet. Für die Versuche werden die Probenflächen bis zu einer Papierkörnung von 800 geschliffen, um vergleichbare Oberflächenzustände zu erhalten.

Für die Durchführung der Korrosionsversuche wird ein Elektrolyt benötigt, der einen ausreichenden korrosiven Angriff während der Versuchszeit gewährleisten kann. Da die Ergebnisse einen ersten Anhaltspunkt für richtungsabhängige Korrosion über lange Zeiträume abbilden sollen, sollten relativ aggressive Bedingungen geschaffen werden. Dabei sollten einige Rahmenbedingungen erfüllt sein, um nicht zu sehr von den realen Verhältnissen gemäß der Literatur abzuweichen. Um geeignete Elektrolyten identifizieren zu können, wurde die Literaturrecherche erweitert. Es wurden hierbei verschiedene Einflussgrößen gefunden, die im Laborversuch nachgestellt werden können und so erwartete reale Einflüsse abbilden können. In einer Stellungnahme der schweizer Kommission Nukleare Entsorgung aus dem Jahr 2010 wurde eine Salinität zwischen 0,005 und 0,7 mol/L als ungünstig definiert. Die Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit hat in einer Empfehlung aus 2020 hohe Karbonatkonzentrationen als problematisch herausgestellt. Ebenfalls unvorteilhaft sollen laut GRS pH-Werte außerhalb von 7 bis 8 sein. Aus diesen Kriterien lassen sich verschiedene Elektrolyte ableiten, die denkbar wären. Möglich wäre Kaliumkarbonat, wodurch bei entsprechender Konzentration die Salinität und das Karbonatkriterium erfüllt werden. Jedoch wird unter Umständen der pH-Wert nicht erreicht. Eine weitere Möglichkeit wäre Kaliumchlorid zu verwenden. Hierdurch wird bei entsprechender Konzentration ebenfalls die Salinität erreicht und auch der pH-Wert kann eingestellt werden, jedoch liegen hier keine Karbonate vor. Um alle drei Bedingungen zu erfüllen bieten sich noch komplexere Verbindungen an, die jedoch dann eine recht starke Abweichung zu den Erwartungen an ein Endlagerstandort darstellen.

4. Geplante Weiterarbeiten

Im weiteren Verlauf sollen die beschriebenen Korrosionsversuche durchgeführt werden. Weiterhin sollen die vorgesehenen Elektronenbeugungsversuche, wie im Aufstockungsantrag vorgesehen, zur weiteren Charakterisierung durchgeführt werden.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine

Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer: TU Clausthal - Lehrstuhl für Geomechanik und multiphysikalische Systeme		Förderkennzeichen: 02 E 11991
Vorhabensbezeichnung: Entwicklung und Validation einer neuartigen Versuchstechnik für triaxiale Kriechversuche bei geringer deviatorischer Belastung (KRIECHTECH)		
Zuordnung zum FuE-Programm: Bereich C1: Standortauswahl, Feld 1.2		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2021 bis 30.09.2024	Berichtszeitraum: 01.01.2023 bis 30.06.2023	
Gesamtkosten des Vorhabens: 304.468,00 EUR	Projektleiter: apl. Prof. Dr.-Ing. habil. Uwe Düsterloh	

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

- AP 1 Konstruktion und Bau von Triaxialprüfständen mit hochpräziser Axial- und Radiallastregelung.
- AP 2 Kalibrierung und Inbetriebnahme der Prüfstände und der zugehörigen Mess- und Regelungssoftware.
- AP 3 Vergleichende Durchführung und Auswertung von Triaxialversuchen mit klassischer spannungsgeregelter Versuchstechnik und neuartiger verzerrungsgeregelter Versuchstechnik im Spannungsbereich von $\sigma_v = 1 \text{ MPa} - 6 \text{ MPa}$.
- AP 4 Numerische Sensitivitätsanalysen zum Einfluss des Kriechverhaltens bei kleinen deviatorischen Spannungen auf das langfristige Trag- und Deformationsverhalten des Gebirges im Umfeld untertägiger Endlager.
- AP 5 Erstellung Schlussbericht.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1: -

AP2: Inbetriebnahme und Kalibrierung der Prüfstände sowie der zugehörigen Mess- und Regelungssoftware konnte nach coronabedingten Lieferverzögerungen abgeschlossen werden. Herstellung von Steinsalzprüfkörper für Kalibrierungs- und Triaxialversuche.

AP3: Durchführung eines Triaxialkriechversuchs mit neuartiger verzerrungsgeregelter Versuchstechnik

AP4: Diskretisierung ausgewählter Tragsysteme für numerische Sensitivitätsanalysen.

Förderkennzeichen: 02E11991

4. Geplante Weiterarbeiten

AP1: -

AP2: -

AP3: Weitere Durchführung und Auswertung von Triaxialversuchen

AP4: Analyse des Tragverhaltens ausgewählter Tragsysteme (1D, rotationssymmetrisch, 2D, 2,5D, 3D) bei Variation des Kriechverhaltens in der Bandbreite zwischen *Norton* und *Lubby2*

5. Berichte, Veröffentlichungen

-

Auftragnehmer: Karlsruher Institut für Technologie (KIT) - Kompetenzzentrum für Materialfeuchte, 76128 Karlsruhe		Förderkennzeichen: 02 E 12001A
Vorhabensbezeichnung: Verbundvorhaben: Sandwich Support Projekt 1: Heterogene Bentonithydratation (Sandwich-SP1), Teilprojekt A		
Zuordnung zum FuE-Programm: C: Endlagerung; C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte; C2.3 Geotechnische und technische Barrieren		
Laufzeit des Vorhabens: 01.12.2021 bis 30.11.2024	Berichtszeitraum: 01.01.2023 bis 30.06.2023	
Gesamtkosten des Vorhabens: 323.058,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Katja Emmerich	

1. Vorhabenziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

AP1: Austauschprozesse, Quelldruckheterogenität und Porositätsentwicklung in Smectiten und Bentoniten aus mineralogischer Sicht (KIT)

AP2: Quelldruckheterogenität von Bentonit aus geotechnischer Sicht (RUB). Es werden Elementversuche zum Quelldruckverlauf bei verschiedenen Randbedingungen sowie zu relevanten Pfaden der Saugspannungs-Wassergehaltsbeziehung durchgeführt.

AP3: Modell zur Quelldruckvorhersage (RUB, KIT). Beschreibung des Quellmechanismus anhand eines skalenübergreifenden Modells.

AP4: Koordination/Berichtswesen (KIT)

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1: Die mineralogische Grundcharakterisierung beider Bentonite ist nahezu abgeschlossen. Beide Bentonite enthalten als Hauptbestandteil dioktaedrische Smectite. Der Tongehalt (< 2µm) nach Aufbereitung nach Tributh-Lagaly und Abtrennung im Schwerefeld ist beim Calcigel deutlich höher als beim Secursol UHP, wobei die Fraktion > 2 µm des Secursol UHP nahezu vollständig aus Smectit besteht. Homoionisches Material der Tonfraktion beider Bentonite Na⁺, K⁺, Ca²⁺ und Mg²⁺ liegt vor. Erwartungsgemäß resultiert die K⁺ Belegung in einem teilweisen Verlust der Quelfähigkeit und einer um ca. 26% geringeren KAK für die Smectite beider Bentonite.

Die Variabilität der Quelldruckergebnisse unter gleichen Einbaubedingungen (Probenhöhen und Trockendichte) in die µCT geeigneten Quelldruckzellen wurde mit den Rohbentoniten (< 250 µm aufgemahlen) mit 15-25% Abweichung vom Mittelwert bestimmt. Das gemahlene Material (< 250 µm) beider Bentonite zeigt 10-20% höhere Quelldrücke als das Rohmaterial im gebrochenen Zustand (< 2mm) bei gleichen Einbaubedingungen (Probenhöhe und Trockendichte).

Testmessungen an trockenen und gesättigten Proben mittels µCT wurden durchgeführt.

AP2: siehe Bericht RUB zu Teilprojekt B (02 E 12001B)

AP3: siehe Bericht RUB zu Teilprojekt B (02 E 12001B)

AP4: Der Projektstand wurde zudem in zwei gemeinsamen Projekttreffen mit dem Sandwich-HP (02E11799A/B/C) präsentiert und diskutiert.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP1: Bestimmung der Partikelmorphologie des Secursol UHP mittels ESEM und AFM, Bestimmung der Hydratationsisothermen

Abschluss der systematischen Untersuchungen in den µCT Quelldruckzellen zum Einfluss der Probengeometrie (Variation d:h) und Einarbeitung in die Bildverarbeitung zur Auswertung der µCT Aufnahmen hinsichtlich Gefüge und Porenverteilung und deren Änderung während der Aufsättigung.

AP4: Publikation der mineralogischen und geotechnischen Grundcharakterisierung, Präsentation der bisherigen Ergebnisse auf der Euroclay 2023

5. Berichte, Veröffentlichungen

keine

Auftragnehmer: Ruhr-Universität Bochum (RUB) – Lehrstuhl für Bodenmechanik, Grundbau und Umweltgeotechnik, 44780 Bochum		Förderkennzeichen: 02 E 12001B
Vorhabensbezeichnung: Verbundvorhaben: Sandwich Support Projekt 1: Heterogene Bentonithydratation (Sandwich-SP1), Teilprojekt B		
Zuordnung zum FuE-Programm: C: Endlagerung; C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte; C2.3 Geotechnische und technische Barrieren		
Laufzeit des Vorhabens: 01.12.2021 bis 30.11.2024	Berichtszeitraum: 01.01.2023 bis 30.06.2023	
Gesamtkosten des Vorhabens: 268.932,00 EUR	Projektleiter: Dr.-Ing. Wiebke Baille	

1. Vorhabenziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

AP1: Austauschprozesse, Quelldruckheterogenität und Porositätsentwicklung in Smectiten und Bentoniten aus mineralogischer Sicht (KIT)

AP2: Quelldruckheterogenität von Bentonit aus geotechnischer Sicht (RUB). Es werden Elementversuche zum Quelldruckverlauf bei verschiedenen Randbedingungen sowie zu relevanten Pfaden der Saugspannungs-Wassergehaltsbeziehung durchgeführt.

AP3: Modell zur Quelldruckvorhersage (RUB, KIT). Beschreibung des Quellmechanismus anhand eines skalenübergreifenden Modells.

AP4: Koordination/Berichtswesen (KIT)

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

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

AP2: Die geotechnische Klassifizierung ist nahezu abgeschlossen.

Die Versuchsserien an volumenkonstanten Quellruckversuchen an homogenen, statisch verdichteten Proben (Cal., SecUHP) wurden auf Bereich der technisch realisierbaren Trockendichten erweitert ($\rho_d=1.25-1.7 \text{ g/cm}^3$) und sind abgeschlossen. Es wurden jeweils zwei Versuchsserien an ödometrischen Kompressionsversuchen an statisch verdichteten Proben (Cal., SecUHP) durchgeführt. Serie 1 wurde an teilgesättigten Proben (as compacted) durchgeführt, während die Proben in Serie 2 zunächst unter volumenkonstanten Bedingungen gesättigt wurden (Quelldruck) und anschließend be-, ent- und wiederbelastet wurden. Es zeigt sich eine deutliche mechanische Degradation des Materials durch das Quellen (Abbau Vorbelastung, geringe elastische Steifigkeit). Die Versuchsserien sind fast abgeschlossen. Die Bestimmung der SWCC für den volumenkonstanten Bewässerungspfad an verschiedenen Trockendichten wurde für den Saugspannungen $< 10 \text{ MPa}$ ergänzt. Die Versuche dauern an.

Die materialspezifische und temperaturabhängige Kalibrierung der TDR-Sensoren für Calcigel und Secursol-UHP wurde abgeschlossen. Der erste Säulenversuch (Calcigel) wurde im Berichtszeitraum (März 2023) gestartet. Die Erfassung der Daten aller Sensoren funktioniert wie geplant und die beobachteten Zeitverläufe sind plausibel.

AP3: Es wurden die Vorarbeiten zu AP3 fortgesetzt (Implementierung von physiko-chemischen Berechnungsansätzen mittels Python-Software).

AP4: siehe Bericht KIT zu Teilprojekt A (02 E 12001A)

4. Geplante Weiterarbeiten

AP2: In Ergänzung der geotechnischen Klassifizierung sollen Versuche zur Wasseraufnahme (Enslin-Neff-Versuch) und eine Sedimentationsanalyse an SecUHP und Calcigel durchgeführt werden sowie jeweils eine Proctorkurve erstellt werden.

Publikation der mineralogischen und geotechnischen Grundcharakterisierung.

Vervollständigung der Elementversuche für beide Bentointe: 1) Quell(druck)versuche mit „technological void“; 2) Quelldruckversuche mit saugspannungskontrollierter Sättigung über die Dampfphase; 3) Quellhebungsversuche im gesamten technisch machbaren Bereich der Trockendichte; 4) abschließende ödometrische Kompressionsversuche. Beendigung der Versuche zur Bestimmung des volumenkonstanten Bewässerungspfades der Saugspannungs-Sättigungs-Beziehung im Bereich der Saugspannungen $< 10 \text{ MPa}$. Fortführung des ersten Säulenversuches (Calcigel). Ermittlung Porengrößenverteilungen mittels Quecksilberporosimetrie.

AP3: Erstellung eines kontinuumsmechanischen Modells (in CodeBright). Kalibrierung der benötigten Parameter mittels Elementversuchen sowie anhand der Porengrößenverteilungen.

5. Berichte, Veröffentlichungen

keine

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 12012A
Vorhabensbezeichnung: Weiterentwicklung von d ^{3f++} : Hydrogeologische Modellierung im regionalen Maßstab (HYMNE II)		
Zuordnung zum FuE-Programm: C3.1 Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-)Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung, Punkt 1,2,3 FuE-Feld C3.3 Werkzeuge der Sicherheitsanalysen, Punkt 2		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2022 bis 30.09.2025	Berichtszeitraum: 01.01.2023 bis 30.06.2023	
Gesamtkosten des Vorhabens: 1.915.790,00 EUR	Projektleiterin: A. Schneider	

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Mit d^{3f++} steht ein Werkzeug zur Modellierung der thermohalinen Grundwasserströmung und des Radionuklidtransportes durch poröse und geklüftete Medien zur Verfügung, das seit 1995 im Rahmen der BMWi-geförderten Vorhaben GRUPRO, TRAPRO, E-DuR, A-DuR, H-DuR GRUSS und HYMNE entwickelt wurde. Derzeit wird es im Rahmen der Projekte DONUT, SIRUB, SUSE, CHRISTA II und Subrosion-ewG auf endlagerrelevante Fragestellungen angewendet. Ziel von HYMNE II sind die Erweiterung und Verbesserung der Anwendbarkeit von d^{3f++} auf Modelle im Sedimentgestein und im Kristallin und eine Erhöhung der Prognosesicherheit. Teilziele sind die Kombination einer verbesserten Darstellung explizit bekannter Klüfte und Störungszonen mit stochastischen Methoden sowohl für DFN- als auch EPM, ein effizienter Umgang mit Datenungleichheiten, die effiziente Modellierung langer Zeiträume, die Berücksichtigung der Salinität in der Permafrost-Modellierung, eine effektivere Modellierung des Nuklidtransportes, numerische Verbesserungen sowie Test und Anwendung des Codes. Die Bearbeitung erfolgt in Kooperation mit der Universität Frankfurt.

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

Folgende Arbeitspakete werden von der GRS bearbeitet:

- AP 1: Erweiterung der Anwendbarkeit von d^{3f++} für Modelle im Kristallin und Ton
 - AP 1.1 Explizit zu berücksichtigende Klüfte/Störungszonen (DFN) (Konzepte)
 - AP 1.2 Kontinuumsmodelle (EPM) (Konzepte)
 - AP 1.3 Technische Verbesserungen (Konzepte)
- AP 2: Erweiterung des Anwendungsbereiches von d^{3f++}
 - AP 2.1 Permafrost: Berücksichtigung der Salinität bei den Phasenübergängen
 - AP 2.2 Radionuklidtransport: Genauere und effektivere Modellierung
- AP 4 Anwendungsrechnungen
 - AP 4.1 Würfel mit Kluffnetzwerk
 - AP 4.2 Äspö site descriptive model
 - AP 4.3 Laborexperiment (Richardsgleichung)
 - AP 4.4 Norddeutscher Küstenraum (Ankopplung Vorfluter)
- AP 5 Wartung des Codes (Unterauftrag)
- AP 6 Projektleitung und Dokumentation

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP 1.1 Tests mit FracMan und dfnWorks wurden durchgeführt.
In d^{3f++} wurde das Einlesen von Modellgeometrien, insbesondere Kluftnetzwerken, im vtu-Format ermöglicht.
- AP 1.2 Das Konzept zur Erstellung von Kontinuumsmodellen ist in Arbeit.
- AP 2.1 Eine Literaturrecherche über den Einfluss der Salinität auf die Zustandsgleichungen unter gefrierenden Bedingungen wurde durchgeführt.
- AP 4.2 Tests mit haliner Strömung und mit einer Senke im Bereich des Äspö HRL wurden durchgeführt.
- AP 4.3 Die Arbeiten an der Modellierung des Laborexperimentes wurden weitergeführt.
- AP 4.4 Die Arbeit am Modell Sandelermöns wurden wieder aufgenommen.
- AP 5 Einige kleinere Probleme, z. B. bei der Parallelisierung von Berechnungen mancher (niederdimensionaler) Kluftnetzwerke und bei der Transportmodellierung, wurden behoben.
- AP 6 Der Kooperationsvertrag mit der Universität Frankfurt ist bei den Rechtsabteilungen von GRS und Universität Frankfurt in Arbeit.
Das erste Projektstatusgespräch fand am 1.3.2023 in hybrider Form an der Uni Frankfurt statt.
Auf dem 41. Meeting von SKBs Grundwasser Task Force wurden aktuelle Ergebnisse zur Erzeugung von Kluftgeometrien und möglichen Fehlerquellen vorgestellt.
Modellergebnisse mit d^{3f++} wurden bei der SIAM Conference on Mathematical & Computational Issues in the Geosciences am 22.6.2023 in Bergen vorgestellt.

4. Geplante Weiterarbeiten

- AP 1.1 Weiterführung der Tests und Test von dfnWorks, Erarbeitung des Konzeptes für die Anbindung des Kluftgenerators
- AP 1.2 Fertigstellung des Konzeptes Anbindung von Kontinuumsmodellen (EPM) an d^{3f++},
- AP 2.1 Die konzeptionellen Arbeiten zur Berücksichtigung der Salinität bei den Phasenübergängen werden abgeschlossen.
- AP 4.2 Die Arbeiten an der Verwendung der Richardsgleichung für das Modell werden fortgeführt.
- AP 4.3 Die Arbeiten am Laborexperiment werden abgeschlossen.
- AP 6 Abschluss des Kooperationsvertrages

5. Berichte, Veröffentlichungen

keine

Auftragnehmer: Johann Wolfgang Goethe Universität Frankfurt		Förderkennzeichen: 02 E 12012B
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Weiterentwicklung von d ^{3f++} : Hydrogeologische Modellierung im regionalen Maßstab (HYMNE II), Teilprojekt B – Kurztitel HYMNE II		
Zuordnung zum FuE-Programm: „BMW-Forschungsförderung zur nuklearen Sicherheit (2021-2025)“, Themenbereich C „Endlagerung“, insbesondere die Forschungs- und Entwicklungsfelder C3.1 Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-) Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung sowie C3.3 Werkzeuge der Sicherheitsanalysen.		
Laufzeit des Vorhabens: 01.12.2022 bis 30.11.2025	Berichtszeitraum: 01.01.2023 bis 30.06.2023	
Gesamtkosten des Vorhabens: 779.892,00 EUR	Projektleiter: Priv.-Doz. Dr. Arne Nägel	

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Das übergeordnete Ziel des Vorhabens ist die Erweiterung und Verbesserung der Anwendbarkeit von d^{3f++} auf Modelle im regionalen Maßstab im Kristallin und im Sedimentgestein. Teilziel 1 (abgebildet in AP1) ist die Erweiterung der Möglichkeiten der Modellierung von Klüften und Störungszonen durch die Anbindung eines Kluftgenerators sowohl für DFN+Matrix- als auch EPM und kombinierte Modelle, um auch statistische Methoden anwenden zu können, sowie die dimensionsadaptive Auflösung größerer Störungszonen in Abhängigkeit vom Rechengitter und von physikalischen Prozessen. Teilziel 2 (abgebildet in AP 2) ist die Erweiterung des Anwendungsbereichs von d^{3f++}, z. B. durch die Verfeinerung der Modellierung von Gefrier- und Auftauvorgängen, Verbesserungen in der Modellierung des Nuklidtransportes sowie eine modulare Modellkopplung. Um eine effektivere Modellierung sehr langer Zeiträume zu ermöglichen, soll in Teilziel 3 (abgebildet in AP 3) ein neues, zeit-paralleles Lösungsverfahren entwickelt und implementiert werden. Der Umgang mit Datenun-gewissheiten und die Robustheit der Lösungsverfahren werden weiter verbessert. Durch die Anwendung der kürzlich implementierten sowie der in diesem Vorhaben zu implementierenden Verfahren auf endlagerrelevante Modelle im regionalen Maßstab im Kluft- und Sedimentgestein, mit freier Grundwasseroberfläche und Vorflutern sowie auf Laborexperimente sollen in Teilziel 4 (abgebildet in AP4) die neuen Möglichkeiten des Programms umfangreich getestet, die Prognosesicherheit gestärkt und das Vertrauen in die Modellierung gestärkt werden. Die Ergebnisse werden zusammen mit den Projektpartnern verwertet. Die große Nutzergemeinde des Simulationssystems UG ist eine ausgezeichnete Plattform zur Verbreitung und Verwertung der Projektergebnisse. Es erfolgt eine Zusammenarbeit mit der Gesellschaft für Reaktorsicherheit (GRS), Braunschweig, und der Firma TechSim, Kieselbronn, als Unterauftragnehmerin der GRS. Das Verbundprojekt ist ein Folgevorhaben des BMW-Projekts vom 01.10.2019 – 30.11.2022 (FKZ 02 E 11809B).

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

Bei der Durchführung des Verbundvorhabens werden folgende Arbeitspakete vom Institut für Informatik (Modellierung und Simulation) der Universität Frankfurt bearbeitet:

AP 1: Erweiterung der Anwendbarkeit von d^{3f++} für Modelle im Kristallin und Ton (1.1 Explizit zu berücksichtigende Klüfte/Störungszonen (DFN), 1.2 Kontinuumsmodelle (EPM), 1.3 Technische Verbesserungen)

AP 2: Erweiterung des Anwendungsbereiches von d^{3f++} (2.1. Permafrost: Berücksichtigung der Salinität bei den Phasenübergängen, ~~2.2. Radionuklidtransport: Genauere und effektivere Modellierung~~)

AP 3: Numerische Verbesserungen (3.1 Zeitparallele Lösungsverfahren, 3.2 Weiterentwicklung des LIMEX-Mehrgitterverfahrens, 3.3 Mehrgitter mit Datenadaptivität, 3.4 Modulare Modellkopplung)

AP 4: Anwendungsrechnungen (4.1 Würfel mit Kluftnetzwerk, 4.2 Äspö site descriptive model, 4.3 Laborexperiment (Richardsgleichung), 4.4 Norddeutscher Küstenraum (Ankopplung Vorfluter))

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP 1: Erweiterung der Anwendbarkeit von d3f++ für Modelle im Kristallin und Ton (1.1 Explizit zu berücksichtigende Klüfte/Störungszonen (DFN), 1.2 Kontinuumsmodelle (EPM), 1.3 Technische Verbesserungen)

Die Arbeiten wurden entsprechend der im Antrag angegebenen Vorgehensweise fortgesetzt.

AP 2: Erweiterung des Anwendungsbereiches von d3f++ (2.1. Permafrost: Berücksichtigung der Salinität bei den Phasenübergängen, ¹¹2.2. Radionuklidtransport: Genauere und effektivere Modellierung)

Der Ansatz aus Grenier et al., 2018 wurde um eine Gleichung für den Salzmassenbruch ω erweitert und die Kurve zur Wassersättigung S_w nach McKenzie et al., 2007 um die Abhängigkeit vom Salzmassenbruch ergänzt, indem ω , molare Masse sowie van't-Hoff-Faktor für die Berechnung der Gefrierpunktserniedrigung auch durch andere Moleküle verursacht werden kann. Getestet wurde an einem Modellproblem in einer 3m x 1m Geometrie aus Grenier mit Temperaturbereich -5°C bis $+5^\circ\text{C}$, gefrorenes Stück im linken Drittel, Fluss in x-Richtung. Das zu erwartende, beschleunigte Schmelzen des Eises in einer 2%-igen salinen Lösung verglichen mit reinem Wasser konnte bestätigt werden ($S_w=3$ erreicht bei 30,25 h respektive 48,79 h).

Es ist zu beachten, dass analog zu Grenier die Dichte in diesem Modellproblem als konstant betrachtet wurde. In der Anwendung wird die Abhängigkeit der Dichte von Temperatur und Salinität voraussichtlich nicht zu vernachlässigen sein.

Im Modellproblem wurde (nach Vorbild von Niklas Conen) die Norm für T (und ggf. ω) aus L2, für den Druck p, der nur als Ableitung einfließt, aus H1 verwendet. Wird auch für p die L2-Norm angesetzt, beschleunigte sich die Rechenzeit bei Reduktion der Anzahl an Zeitschritten. Eine genauere Analyse zur Wahl der Norm steht noch aus.

AP 3: Numerische Verbesserungen (3.1 Zeitparallele Lösungsverfahren, 3.2 Weiterentwicklung des LIMEX-Mehrgitterverfahrens, 3.3 Mehrgitter mit Datenadaptivität, 3.4 Modulare Modellkopplung)

Es wurde ein Mechanismus für die Kopplung des Untergrundflusses (Richards) mit einem Vorfluternetzwerk nach Saint-Venant durch einen Boundarycondition-switching Algorithmus (Wu et al., 2020) entwickelt. Dabei wird in jedem Zeitschritt der Wasserdruck im Untergrund zusammen mit dem entsprechenden Wasserstand auf der Oberfläche verrechnet und abhängig vom Ergebnis ein Massenfluss in oder aus dem Untergrund über Randbedingungen (Untergrund) und Quellterme (Vorfluter) festgelegt. Die Simulation des Vorfluternetzwerks ist fertiggestellt, die Kopplung wird gerade ausgearbeitet.

AP 4: Anwendungsrechnungen (4.1 Würfel mit Kluftnetzwerk, 4.2 Äspö site descriptive model, 4.3 Laborexperiment (Richardsgleichung), 4.4 Norddeutscher Küstenraum (Ankopplung Vorfluter))

Die parallele Berechnung des Grundwasserflusses durch die dreidimensionalen Gebiete mit den völlig verbundenen Klüften ist bei der Gitterumverteilung nach einmaliger Verfeinerung fehlgeschlagen. Das verfeinerte Gitter und die Umverteilung auf jedem Prozess wurden Schritt um Schritt gespeichert, um die Fehler zu finden. Außerdem wurde nach einigen Tests gefunden, dass der Umverteilungsfehler nach einmaliger Verfeinerung verhindert wurde, wenn der Fluss auf dem größten Gitter nur von einem Prozess berechnet wurde. Das bedeutet, dass das Multigitter in UG4 nur die Einzelprozessberechnung des Grundwasserflusses auf dem größten Gitter unterstützt. Es werden weitere Untersuchungen auf dem gespeicherten Gitter durchgeführt, um eine bessere Lösung zu finden.

4. Geplante Weiterarbeiten

Die Arbeiten werden entsprechend der im Antrag angegebenen Vorgehensweise fortgesetzt.

5. Berichte, Veröffentlichungen

- keine -

Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer: TU Clausthal – Lehrstuhl für Geomechanik und multiphysikalische Systeme		Förderkennzeichen: 02 E 12022A
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Internationales Benchmarking zur Verifizierung und Validierung von TH ² M-Simulatoren insbesondere im Hinblick auf fluiddynamische Prozesse in Endlagersystemen - Erweiterung auf multiphysikalische Ansätze und mehrdimensionale Modellgeometrien (BenVaSim II), Teilprojekt A		
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung (C)		
Laufzeit des Vorhabens: 01.02.2023 bis 31.01.2026	Berichtszeitraum: 01.02.2023 bis 30.06.2023	
Gesamtkosten des Vorhabens: 523.623,00 EUR	Projektleiter: Eleni Gerolymatou	

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Weltweit werden bereits mehrere Simulationscodes für die Modellierung des vollständigen TH²M-gekoppelten Materialverhaltens des Wirtgesteins und der geotechnischen Barrieren eingesetzt. Die Funktionalitätsüberprüfung und die Validierung der Simulationswerkzeuge stellen jedoch kontinuierliche Prozesse dar. Bei numerischen Simulationen dieses Komplexitätsgrades können Fehler aus unterschiedlichen Quellen entstehen: (a) Anwenderfehler, (b) Modellfehler und (c) Implementierungsfehler. Die wohl schwerwiegendsten Fehler haben ihren Ursprung in der Implementierung des Programmcodes. In diesem Fall sind die zugrunde liegenden physikalischen Prozesse nicht korrekt implementiert oder es werden nicht nachvollziehbare Annahmen getroffen. Ziel des ersten BenVaSim-Projekts war es, einige der im Bereich der nuklearen Entsorgung am häufigsten eingesetzten Simulatoren im Hinblick auf Punkt (c) zu verifizieren und grundlegende Leitlinien für Punkt (a) zu formulieren, während Punkt (b) derzeit im Rahmen anderer Projekte, z. B. DECOVALEX 2023, untersucht wird. In der zweiten Projektphase sind neben der Fertigstellung der ursprünglichen Ziele von BenVaSim die Erweiterung der Verifikation auf komplexere Geometrien und die Berücksichtigung eines komplexeren Materialverhaltens für das Wirtgestein vorgesehen. Auch der Vergleich zu analytischen oder semianalytischen Lösungen wird fortgeführt und erweitert.

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

- WP1: Entwicklung generischer Berechnungsmodelle und Definition von Parametersätzen - jeweils für Modelle 1.4 (eindimensional), 2 (Längsschnitt) und 3 (Querschnitt)
- WP2: Durchführung und Auswertung von Modellrechnungen- jeweils für Modelle 1.4 (eindimensional), 2 (Längsschnitt) und 3 (Querschnitt)
- WP3: Gemeinsamer Vergleich und Diskussion der Ergebnisse
- WP4: Dokumentation der Ergebnisse und Erstellung eines Syntheseberichts

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Bisher wurden unter den Projektpartnern vier Treffen durchgeführt. Die Modelle 1.4, 2.1 und 3.1 wurden entwickelt und die entsprechenden Materialparameter wurden in Abstimmung mit den Partnern definiert. Erste Simulationsergebnisse seitens der TU Clausthal liegen vor. Python-Skripte für die Automatisierung des graphischen Vergleichs der Ergebnisse wurden erstellt und für die Projektpartner zu Verfügung gestellt.

4. Geplante Weiterarbeiten

Für das nächste Halbjahr werden die Simulationsergebnisse der Partner zum Model 1.4 erwartet. Weiterhin werden die Modelle 2.2 und 3.2 entwickelt und die entsprechenden Parameter definiert.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Noch keine vorhanden.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 12022B	
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Internationales Benchmarking zur Verifizierung und Validierung von TH ² M-Simulatoren insbesondere im Hinblick auf fluiddynamische Prozesse in Endlagersystemen - Erweiterung auf multiphysikalische Ansätze und mehrdimensionale Modellgeometrien (BenVaSim II), Teilprojekt B			
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept des BMUV 2021 - 2025: FuE-Bereich 3: „Sicherheitsnachweis“ und dort insbesondere das FuE-Feld: 3.1 „Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-) Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung“			
Laufzeit des Vorhabens: 01.02.2023 bis 31.01.2026		Berichtszeitraum: 01.01.2023 bis 30.06.2023	
Gesamtkosten des Vorhabens: 512.650,00 EUR		Projektleiterin: Larissa Friedenberg	

1. Vorhabenziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Gesamtziel des Vorhabens ist die Weiterverfolgung der in dem Vorgängerprojekt BenVaSim-I entwickelten Idee des Benchmarkings mit einfachen Modellgeometrien und Betrachtung der Basisprozesse, die jeder komplexeren Modellierung zu Grunde liegen. Die Ergebnisse sollen mit analytischen oder semi-analytischen Lösungen verglichen werden, um die Rückverfolgbarkeit zu gewährleisten. Zunächst sollen die fehlenden Lücken für die thermischen Prozesse und deren Wechselwirkungen mit hydraulischen und mechanischen Prozessen im Eindimensionalen geschlossen werden. Die gewonnenen Erkenntnisse über die grundlegenden Prozesse werden im nächsten Schritt auf zweidimensionale Modelle erweitert.

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

AP 1: Entwicklung generischer Simulationsmodelle und Definition von Parametersätzen

Für das Benchmarking müssen generische Parametersets und Modelle entwickelt werden, welche grundlegende Prozesse in einem Endlager für wärmeentwickelnden, radioaktiven Abfall berücksichtigen. Für jedes Modell sollen verschiedene Szenarien definiert werden, welche Änderungen in den Parametern oder Randbedingungen beinhalten.

AP 2: Durchführung und Bewertung von Modellrechnungen

Die in AP1 entwickelten Modelle und Szenarien sollen in diesem Arbeitspaket angewendet werden. Hierbei werden der Modellierungsprozess, die Performance der numerischen Berechnung und die Ergebnisse dokumentiert.

AP 3: Vergleich und Diskussion der Ergebnisse

In diesem Arbeitspaket werden zuerst Bewertungsgrößen für die Ergebnisvergleiche definiert. Dann sollen die Ergebnisse der einzelnen Modelle aller Partner verglichen und im Kollektiv diskutiert werden.

AP 4: Synthese und Präsentation der Endergebnisse

In AP4 werden die Ergebnisse der Arbeitspakete dokumentiert und zusammengefasst sowie die Richtung für die systematische Lösung der verbleibenden Fragen festgelegt. Die Ergebnisse sollen laufend international präsentiert werden.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Am 06.02.2023 fand das Kick-off Meeting als Hybridveranstaltung bei der TU Clausthal statt. Es wurde über das Vorgehen diskutiert und erste Ansätze vorgestellt. Für die weitere Planung des Projekts und erste Evaluierungen von Pilotsimulationen fanden drei Onlinemeetings am 02.05.2023, 05.06.2023 und 10.07.2023 statt.

Die GRS beteiligt sich an dem Projekt mit zwei Simulationscodes: CODE_BRIGHT und Comsol Multiphysics. Im Berichtszeitraum wurden erste Simulationen des eindimensionalen Modells durchgeführt, welches sich auf die Kopplung der thermischen Prozesse mit den hydraulischen und mechanischen Aspekten konzentriert. Außerdem unterstützt die GRS die Projektkoordination bei der Findung und Herleitung von analytischen Lösungen für zweidimensionale Modelle.

4. Geplante Weiterarbeiten

Bearbeitung der einzelnen APs entsprechend der Vorhabensbeschreibung.

5. Berichte, Veröffentlichungen

- keine -

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02E12032
Vorhabensbezeichnung: Methoden zur experimentellen und numerischen Analyse der geologischen Barriere eines Endlagers in tonreichen Sedimentgesteinsformationen (MAGNUS)		
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept des BMWi 2021 - 2025: FuE-Bereich: C „Endlagerforschung“; FuE-Feld: 3.1 „Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THM) Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung“		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2022 bis 30.09.2025	Berichtszeitraum: 01.01.2023 bis 30.06.2023	
Gesamtkosten des Vorhabens: 1.462.465,00 EUR	Projektleiter: Dr. Marvin Middelhoff	

1. Vorhabenziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Das Gesamtziel des MAGNUS-Vorhabens ist die Evaluierung, Optimierung und Standardisierung von experimentellen sowie numerischen Methoden, die zur Analyse des richtungs- und zeitabhängigen Verhaltens von tonreichem Sedimentgestein unter thermischen, hydraulischen und mechanischen (THM) Randbedingungen genutzt werden. Die Zielstellungen der verschiedenen Arbeitspakete des MAGNUS-Vorhabens sind so miteinander gekoppelt, dass das multimaßstäbliche Materialverhalten einer (repräsentativen) tonreichen Sedimentgesteinsformation (Sandige Fazies des Opalinustons (OPA-S), FL Mont Terri, CH) unter Verwendung eines lokalen zeitabhängigen anisotropen THM gekoppelten Stoffmodells (Mánica-Modell), einschließlich der Berücksichtigung eines qualifizierten Eingangssparametersatzes, reproduziert werden kann. Abschließend können die gewonnenen Ergebnisse der Verbesserung von Prognoserechnungen, die im Rahmen von (repräsentativen) vorläufigen Sicherheitsuntersuchungen (rsVU) für ein Endlager in tonreichem Sedimentgestein durchgeführt werden, dienen.

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

AP 1: Probenahme und Probelagerung

Das Ziel des **UAP 1.1** ist die Evaluierung, Optimierung und Standardisierung von Methoden zur Entnahme von repräsentativen Probenmaterial aus OPA-S. Im Rahmen dieses UAP wird ein Mini-Mine-By (MMB)-Experiment in situ durchgeführt, in welchem zunächst eine Mindestprobenahmetiefe sowie der Effekt der eigentlichen Probenahme auf die umliegende Gesteinsformation untersucht werden. **UAP 1.2** beabsichtigt die Konzeptionierung und Evaluierung von Behältern, die den Transport und die langfristige Lagerung von Probenmaterial aus tonreichem Sedimentgestein ermöglichen.

AP 2: Methodenentwicklung zur experimentellen Analyse im REV-Maßstab

Das Ziel des **UAP 2.1** ist die Evaluierung, Optimierung und Standardisierung von experimentellen Methoden zur Analyse des richtungs- und zeitabhängigen Materialverhaltens von OPA-S im Maßstab des repräsentativen elementaren Volumens (REV-Maßstab) unter abstrahierten THM Randbedingungen. Im Rahmen dieses UAP werden insbesondere zeitunabhängige sowie zeitabhängige triaxiale Kompressionsexperimente (TC- und TCc-Experimente) durchgeführt. Während der Entwicklung der Methodik werden Materialparameter generiert, die für die anschließende Reproduktion des Verhaltens mittels Simulationen essenziell sind. Das Ziel des **UAP 2.2** ist die Generation der physikalischen Eingangssparameter für das Mánica-Modell.

AP 3: Methodenentwicklung zur numerischen Analyse in multiplen Maßstäben

UAP 3.1 umfasst drei Zielstellungen: Es werden zunächst numerische Modelle mittels des Finite-Elemente-Codes „CODE_BRIGHT“ im Pre- und Postprozessor „GiD“ generiert. Anschließend werden sie in Verbindung mit dem Mánica-Modell verwendet, um die zuvor durchgeführten

Experimente unter Berücksichtigung der Initial- sowie Randbedingungen zu reproduzieren. Während der Reproduktion der Experimente werden die numerischen Eingangsparameter ermittelt und der Eingangsparametersatz für den REV-Maßstab qualifiziert. Im Rahmen des **UAP 3.2** wird der Eingangsparametersatz in Verbindung mit dem Mánica-Modell zur Verbesserung der Simulationen von In situ-Experimenten (z.B. SANDWICH, Mini-Mine-By) verwendet und somit in multiplen Maßstäben qualifiziert.

AP 4: Dokumentation

In AP4 werden die Ergebnisse der Arbeitspakete dokumentiert und zusammengefasst sowie verbleibenden Fragenstellungen synthetisiert.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im Berichtszeitraum wurde mit der Sichtung, Zusammenstellung und Synthese relevanter Literatur fortgeschritten.

Es wurde im Rahmen des **UAP 1.1** mit der Einrichtung des MMB-Experiments in der OPA-S begonnen. Gemäß der entwickelten Methodik wurden dazu drei GRS-Mini-Piezometer in Teufen von 3m, 6m und 12m installiert. Die erste Datenauswertung zeigte, dass alle Mini-Piezometer im Gebirge hydraulisch angeschlossen sind, und sich in dem Zeitraum von der Installation bis zur Berichtserstellung noch keine Gleichgewichtsbedingungen eingestellt haben. Alle gemessenen Porendrücke liegen im positiven Bereich.

Des Weiteren wurde mit der Konzeption einer Methodik begonnen, die dazu dient, repräsentatives Probenmaterial standardisiert zu entnehmen, strukturgeologisch zu charakterisieren und zu dokumentieren.

Im Rahmen des **UAP 1.2** wurde ein Transport- und Lagerbehälter für Bohrkern aus tonreichen Sedimentgesteinsformationen konzipiert.

4. Geplante Weiterarbeiten

Bearbeitung der einzelnen APs entsprechend der Vorhabenbeschreibung.

5. Berichte, Veröffentlichungen

- entfällt -

Auftragnehmer: BGE TECHNOLOGY GmbH, Eschenstraße 55, 31224 Peine		Förderkennzeichen: 02 E 12042A	
Vorhabensbezeichnung: Erarbeitung einer Methodik zur systematischen Ableitung von zu erwartenden und abweichenden Entwicklungen im Kristallingestein in Deutschland und exemplarische Anwendung als Grundlage zur Bewertung des sicheren Einschlusses unter Berücksichtigung von Optimierungsmaßnahmen			
Zuordnung zum FuE-Programm: FuE-Feld C3.2: Methodische Grundlagen der Nachweisführung <ul style="list-style-type: none"> • Methodik der Szenarienentwicklung • Methoden zur Bewertung der Robustheit des Sicherheitsnachweises FuE-Feld C3.3: Werkzeuge der Sicherheitsanalysen <ul style="list-style-type: none"> • Aktualisierung, Weiterentwicklung und weitere Qualifizierung der Methoden und Rechenprogramme für Langzeitsicherheitsanalysen einschließlich der Analyse für Ungewissheiten 			
Laufzeit des Vorhabens: 01.11.2022 bis 31.10.2025		Berichtszeitraum: 01.01.2023 bis 30.06.2023	
Gesamtkosten des Vorhabens: 418.017,25 EUR		Projektleiter: Dr. Christian Müller	

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Die Sicherheitsbewertungen, die regulatorisch gefordert sind, sollen auf Basis erwarteter und abweichender Endlagerentwicklungen erfolgen. Ein wesentliches Ziel dieses Vorhabens ist daher die Entwicklung einer Methodik zur systematischen Ableitung dieser Endlagerentwicklungen sowie ein Anwendungstest am Beispiel eines generischen Kristallinstandortes. In engem Zusammenhang mit den Endlagerentwicklungen werden Optimierungsmöglichkeiten für das Endlagersystem abgeleitet sowie Optionen zur Stärkung der Robustheit des Systems. Weiterentwicklungen von Konzepten zur Integritätsanalyse kristalliner Gesteine inklusive einer Analyse damit verbundener Unsicherheiten runden das Vorhaben ab.

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

- AP 1: Methodik zur Ableitung von Entwicklungen für Endlagersysteme, deren Sicherheit auf technischen und geotechnischen Barrieren beruht
AP 2: Bewertung einer Kombination bisheriger Einlagerungsoptionen
AP 3: Weiterentwicklung eines Modellierungskonzepts zur Analyse der Integrität eines ewG im Kristallingestein im Zusammenhang mit der Kombination von Einlagerungsoptionen
AP 4: Optimierungsmöglichkeiten im Endlagersystem

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1: In diesem AP soll die Frage geklärt werden, wie sich die zu erwartenden und abweichenden Endlagerentwicklungen systematisch und nachvollziehbar ableiten lassen. Im Zuge von grundlegenden Diskussionen wurde gezeigt, dass die für Salz und Ton entwickelte Methodik zur Ableitung von Szenarien für Kristallingestein prinzipiell anwendbar ist. Es sind aber Gesteins- und konzeptspezifische Anpassungen erforderlich. Wesentliche Prozesse für die Systementwicklung (Behälter-Versagen, Buffer-Erosion) wurden diskutiert und die Ergebnisse in neue bzw. überarbeitete FEP übernommen. Zur optimierten Nutzung bei der Szenarienentwicklung wurde eine neue FEP-Datenbank erstellt. Die Methodik zur Szenarienentwicklung wird durch die Erstellung von Ausprägungsdokumenten für Initialgruppen optimiert.

AP2: In diesem Arbeitsprogramm soll bewertet werden, wie sich die Kombination der bisherigen Optionen (mKBS-3-Konzept, multiples ewG-Konzept und überlagernder ewG) auf die Sicherheitsbewertung auswirken würde und ob sie zu einem Robustheitsgewinn führt. Die Bewertung soll mittels Integritätsprüfungen, den Indikatoren zum sicheren Einschluss und einer Dosisabschätzung erfolgen. Es wurde zunächst ein Ansatz diskutiert, bei dem die genannten drei Optionen in einem Berechnungsmodell abgebildet werden. Basis dieses Berechnungsmodells bildet das mKBS-Konzept mit seinen relevanten Barrieren, welches um die Barrieren der ewG-Konzepte ergänzt wird. Durch die Wahl geeigneter Parameter für die Barrieren und damit Einstellung von deren Qualität können alle Konzeptkombinationen und weitere Varianten untersucht werden. Die Bewertung erfolgt über Transportpfade an festgelegten Messpunkten. Die Position der Messpunkte orientiert sich an der Lage der wesentlichen Barrieren aus den drei Optionen.

AP4: Ziel dieses APs sind Untersuchungen zu Optimierungsmöglichkeiten eines Endlagersystems gemäß EndlSiAnfV (§12). Nach §12 der EndlSiAnfV ist insbesondere sowohl die Qualität des sicheren Einschlusses und die Robustheit des Endlagersystems als auch die Betriebssicherheit zu optimieren. Es besteht Konsens zwischen den Projektpartnern, dass bei den zu entwickelnden Optimierungsmaßnahmen sowohl die Langzeitsicherheit als auch die Betriebssicherheit in Kombination betrachtet werden muss. Des Weiteren wurde erörtert, in welchen Betrachtungszeiträumen und in welchen Bereichen eine Optimierung des Endlagersystems ansetzen kann. Begonnen wurde mit der Untersuchung, ob hier insbesondere der FEP-Katalog eine Grundlage darstellen kann, um auf Basis der dort genannten Komponenten und Prozesse die Optimierungsmaßnahmen systematisch und begründbar abzuleiten.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP1: Weiterführung der Arbeiten an der neuen FEP-Datenbank und exemplarische Anwendung der Methodik zur Szenarienableitung (Ausprägungsdokument für Initialgruppe).

AP2: Erstellung des Berechnungsmodells, Parametrierung des Berechnungsmodells und Durchführung erster Rechnungen.

AP4: Die Ableitung möglicher Optimierungsmaßnahmen auf Basis des FEP-Katalogs soll exemplarisch für die auf die Behälter einwirkenden FEPs und durch die Änderungen am Behälter beeinflussten FEP in der Betriebsphase erfolgen.

5. Berichte, Veröffentlichungen

-

Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer: GRS gGmbH, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 12042B
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Erarbeitung einer Methodik zur systematischen Ableitung von zu erwartenden und abweichenden Entwicklungen im Kristallingestein in Deutschland und exemplarische Anwendung als Grundlage zur Bewertung des sicheren Einschlusses unter Berücksichtigung von Optimierungsmaßnahmen (CHRISTA-III), Teilprojekt B		
Zuordnung zum FuE-Programm: Forschung zur nuklearen Sicherheit Bereich C3: Sicherheitsnachweis, Feld: 3.2; Feld: 3.3		
Laufzeit des Vorhabens: 01.11.2022 bis 31.10.2025	Berichtszeitraum: 01.01.2023 bis 30.06.2023	
Gesamtkosten des Vorhabens: 612.785,00 EUR	Projektleiter: Mayer	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

In CHRISTA-II wurde ein methodisches Vorgehen zur sicherheitlichen Bewertung von Endlagersystemen im Kristallin in Deutschland für die drei in der Machbarkeitsstudie CHRISTA identifizierten Einlagerungsoptionen „überlagernder ewG“ (üewG), „multipler ewG“ (mewG) und „modifiziertes KBS-3-Konzept“ (mKBS3) erarbeitet und für generische Endlagermodelle exemplarisch getestet. Aufbauend auf den in CHRISTA-II abgeleiteten FEP-Katalogen sollen im Verbundprojekt von BGR, BGETEC und GRS CHRISTA-III erstmalig exemplarisch zu erwartende und abweichende Entwicklungen sowie Maßnahmen zur Optimierung des Endlagersystems basierend auf den diesen abgeleitet werden. Die bisherigen Ergebnisse legen nahe, dass die Anwendung eines Systems aus (geo-)technischen Barrieren als wesentliche Barrieren scheinbar Vorteile hinsichtlich der Bewertung der Sicherheit des Endlagersystems hätte. Die zusätzliche Ausweisung eines oder mehrerer ewG könnte hier allerdings zu einer erhöhten Robustheit des Endlagersystems führen. Daher sollen die bisherigen Endlageroptionen kombiniert und damit der mögliche Robustheitsgewinn mithilfe von Integritätsprüfungen und Dosisabschätzung dargestellt werden. Eine Bewertung des Einflusses der Kluffverteilung auf die Integrität der geologischen Barriere soll vorgenommen und Optimierungsmöglichkeiten sollen dargestellt und bewertet werden.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Bei der Durchführung des Vorhabens werden folgende Arbeitspakete bearbeitet:

- AP 1: Methodik zur Ableitung von Entwicklungen für Endlagersysteme, deren Sicherheit auf technischen und geotechnischen Barrieren beruht
- AP 2: Bewertung einer Kombination bisheriger Einlagerungsoptionen
- AP 3: Weiterentwicklung eines Modellierungskonzepts zur Analyse der Integrität eines ewG im Kristallingestein im Zusammenhang mit der Kombination von Einlagerungsoptionen
- AP 4: Optimierungsmöglichkeiten im Endlagersystem
- AP 5: Dokumentation

Die GRS ist an den Arbeiten in AP 1 - 5 beteiligt und federführend im AP2.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP 2: Am 7.6. und 05.06.2023 fanden die ersten Projekttreffen für AP 2 statt, in dem eine Kombination von Endlagerkonzepten für das Kristallin untersucht werden soll. Die Projektpartner haben ihre geplanten Arbeiten vorgestellt und diskutiert sowie eine Vorgehensweise abgestimmt.
- AP 3: Auf dem Projekttreffen am 9.3.2023 wurden die geplanten Arbeiten der Projektpartner dargestellt und abgestimmt. Zur Modellierung der Grundwasserströmung und des Stofftransportes für ein kombiniertes mewG- und mKBS-3-Konzept wurden Daten ausgetauscht und abgestimmt. Ein erstes vereinfachtes Modell wurde erstellt und beispielhafte Rechnungen ausgeführt.

4. Geplante Weiterarbeiten

- AP 2: Es ist für AP 2 geplant, das Referenzkonzept (mKBS3-Konzept) mit den Konzeptkombinationen (mKBS-3 und mewG bzw. mKBS-3 und üewG-Konzept) zu vergleichen und einen möglichen Sicherheitsgewinn zu quantifizieren. Als Ausgangspunkt wird die in AP 1 identifizierte erwartete Entwicklung unterstellt sowie der Zeitpunkt und die Anzahl ausfallender Behälter variiert. Eine Berechnung des sicheren Einschlusses erfolgt in einem ersten Schritt mit Claypos. Anschließend soll auch eine vergleichende Berechnung mit NaTREND erfolgen.
- AP 3: Für das kombinierte mewG und mKBS-3 Modell sollen die Ausbreitungspfade von I-129 und Cs-135 für einen repräsentativen mewG durchgeführt und dabei verschiedene Kluftverteilungen berücksichtigt werden. Auch sind Transportberechnungen in einem 3D Modell vorgesehen, um Einflüsse aus den benachbarten mewG bei der Bewertung berücksichtigen zu können.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e.V., Bautzner Landstrasse 400, 01328 Dresden		Förderkennzeichen: 02 E 12052A
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Konkurrenz und Reversibilität bei Sorptionsvorgängen (KuRSiv), Teilprojekt A		
Zuordnung zum FuE-Programm: FuE-Bereich C1 Standortauswahl; FuE-Felder C1.1 Geowissenschaftliche und geotechnische Methoden zur Standorterkundung (Feld und Labor), C1.2 Charakterisierung des Geosystems und Geosynthese, C1.3 Methodische Grundlagen eines Standortvergleichs		
Laufzeit des Vorhabens: 01.01.2023 bis 30.06.2026	Berichtszeitraum: 01.01.2023 bis 30.06.2023	
Gesamtkosten des Vorhabens: 557.539,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Vinzenz Brendler	

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Das Verbundprojekt KuRSiv (Partner: Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Braunschweig, und Institut für Nukleare Entsorgung des KIT (KIT-INE)) untersucht die Rückhaltung von Radionukliden (RN) an Mineralphasen in Gegenwart von Aluminium und anderen Metallkationen, die aus der Auflösung der Minerale entstehen. Der Schwerpunkt der experimentellen Arbeiten ist zum einen auf das Verständnis der Nukleation, dem ersten Schritt in der Bildung von Mineralphasen, gerichtet. Weiterhin soll die Sorption der RN z.B. aufgrund von Auflösung der Mineralphasen als kompetitiver Prozess mit Metallionen aus der Mineralauflösung oder generell dem Porenwasser beschrieben werden, die mit den RN um Sorptionsplätze konkurrieren. In Kombination soll KuRSiv die für eine realistische Beschreibung der RN-Rückhaltung in hochkomplexen Systemen notwendigen Modelle bereitstellen inklusive einer realistischen Parametrisierung. Dies soll die Vorhersagequalität und Praktikabilität entsprechender Modellierungen erhöhen und damit das Vertrauen der Öffentlichkeit, der wissenschaftlichen Gemeinschaft und der Aufsichtsbehörden in solche Vorhersagen stärken.

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

- AP 1: State-of-the-Art: Bewertung
- AP 2: Kompetitive Effekte
- AP 3: Oberflächenausfällungen
- AP 4: Oberflächenpotential und -ladung (ohne direkte HZDR-Beteiligung)
- AP 5: Thermodynamische Daten & Modell
- AP 6: Proof-of-Concept
- AP 7: Koordination, Wissenstransfer

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Bisher wurden noch keine signifikanten Arbeiten durchgeführt, da noch kein Personal eingestellt wurde. Es erfolgten lediglich in-kind-Arbeiten zur Ertüchtigung der Laborarbeitsplätze, zum Screening der thermodynamischen Daten für die im Projekt adressierten Stoffsysteme, sowie Updates in der Auswertesoftware für die Oberflächen-Diffraktometrie. Weiterhin wurden Arbeiten an der Rossendorf-Beamline der ESRF vorangetrieben, um einen zügigen Einstieg in die experimentellen Arbeiten zu ermöglichen.

4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1: Zusammenstellung der Literaturbefunde zu Konkurrenzreaktionen an Mineraloberflächen (hier: Feldspäte, Glimmer, Quarz) und zu entsprechenden Oberflächenausfällungen.
- AP2: Beschaffung/Herstellung und Charakterisierung von Glimmern, Al-freien Feldspäten und Quarz, Screeningversuche (Batch) zu Oberflächenreaktionen von Aluminium und Eisen.
- AP3: Erarbeitung und Test eines Workflows mit inaktiven Sorptiven, Übertragung auf Th, Oberflächencharakterisierung aller verwendeten Mineralphasen.

5. Berichte, Veröffentlichungen

keine

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 12052B	
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Konkurrenz und Reversibilität bei Sorptionsvorgängen (KuRSiv), Teilprojekt B			
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept des BMWi 2021 - 2025: C1.1 Geowissenschaftliche und geotechnische Methoden zur Standorterkundung (Feld und Labor), C1.2 Charakterisierung des Geosystems und Geosynthese (jeweils insbesondere in Bezug auf Mineralogie und Hydrogeochemie), C1.3 Methodische Grundlagen eines Standortvergleichs sowie C2.3 Geotechnische und technische Barrieren Relevant für alle Wirtsgesteine			
Laufzeit des Vorhabens: 01.01.2023 bis 30.06.2026		Berichtszeitraum: 01.01.2023 bis 30.06.2023	
Gesamtkosten des Vorhabens: 721.047,00 EUR		Projektleiter: Dr. Susan Britz	

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Das Verbundprojekt KuRSiv (Partner: Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e.V. (HZDR, Verbundkoordinator) und Institut für Nukleare Entsorgung des KIT (KIT-INE)) basiert auf aktuellen Fragestellungen, die sich aus den Vorhaben WEIMAR sowie SMILE ergeben haben. In KuRSiv sollen die komplexen Wechselwirkungen bei Sorptionsvorgängen und ihren Folgeprozessen eingehend untersucht werden, basierend auf Strukturcharakterisierungen und einem mechanistischen Verständnis geeignete robuste thermodynamische Modelle entwickelt und diese dann entsprechend mit Parametern inklusive deren Ungewissheiten ausgestattet werden. Im Detail sollen

- (i) die Charakterisierung von kompetitiver Sorption an Mineralphasen (vorrangig Feldspat, Glimmer) in Gegenwart umweltrelevanter Konzentrationen dreiwertiger Metalle (z.B. Al) beschrieben werden,
- (ii) die Bildung & Struktur von Oberflächenpräzipitaten mit und ohne Beteiligung von Radionukliden sowie der Änderungen der Sorptionseigenschaften des Substrates durch solche Präzipitate charakterisiert werden (z.B. mittels TRLFS, μ TRLFS, SXD, Rasterkraftmikroskopie, Alpha-Spektroskopie, Autoradiographie) und
- (iii) mechanistische Modelle zur Retardation an Mineraloberflächen abgeleitet werden (z.B. DLM).

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

- AP1: Literaturrecherche, Erfassung des State-of-the-Art
- AP2: Experimentelle Arbeiten zu kompetitiven Effekten
- AP3: Experimentelle Charakterisierung von Oberflächenausfällungen
- AP4: Experimentelle Charakterisierung des Oberflächenpotentials und -ladung
- AP5: Entwicklung, Implementierung und Parametrisierung struktur- und prozessbasierter thermodynamischer Modelle
- AP6: Modellvalidierung für Mineral-Porenwasser-Systeme als Proof-of-Concept
- AP7: Koordination, Qualitätssicherung, Dokumentation und Knowledge-Transfer

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1: Es wurde die Literaturrecherche zur Erfassung des Standes von Wissenschaft und Technik bzgl. Oberflächenausfällungen, deren Einfluss auf die Sorption von trivalenten Actinide und Lanthanide und die Identifizierung von Oberflächenpräzipitaten begonnen. Hierfür wurde eine bib.tex Datei angelegt, um eine gute Koordination mit den Partnern für die Literaturrecherche zu gewährleisten und effizient arbeiten zu können.

AP2: Zur Präparation von Al-freien Proben, wie es im Vorhaben geplant ist, müssen alle Komponenten, die zur Probenpräparation benötigt werden, bestmöglich vor Al-Kontaminationen geschützt werden. Es hat sich in verschiedenen bereits abgeschlossenen Vorhaben gezeigt (z.B. SMILE – FKZ 02 E 11668A, WEIMAR – FKZ 02 E 11072A), das selbst in Chemikalien, die über eine ultra-pur Klassifikation verfügen, Al in relevanten Anteilen enthalten sein kann. Aus diesem Grund wurden verschiedene Sub-boiling Anlagen von zwei Herstellern für die Aufreinigung von HNO_3 in Bezug auf Handhabung und Platzbedarf getestet. Es hat sich gezeigt, dass die Sub-boiling Anlage CleanAcid CA3-125ml des Anbieters AHF Analystechnik die für uns vorteilhaftesten Eigenschaften aufweist. Diese Anlage wird getestet, wobei die Reduzierung der Al Gehalte mit jedem Destillationsschritt mittels ICP-MS Analytik quantifiziert wird.

Des Weiteren konnten Batch-Proben (Eu – Quarz unter Einfluss von Al) in Grenoble an der Beamline analysiert werden. Die Ergebnisse werden einen Beitrag zu der Fragestellung leisten, in wie weit allgegenwärtiges Al Einfluss auf die Sorption von Eu(III) hat.

AP7: Über die Lehrveranstaltung „Mobilisierung und Migration von Radionukliden im Untergrund“ an der TU Clausthal konnte ein Beitrag zum Wissenstransfer geleistet werden. Studierende wurden in der Lehrveranstaltung u.a. zur Rückhaltung von trivalenten Ln und Ac und zum reaktiven Stofftransport im Nah- und Fernfeld unterrichtet.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP1: Weiterführung der Literaturrecherche zum State-of-the-Art in Zusammenarbeit mit den Partnern.

AP2: Es sind Experimente zur Synthese von Al-freien Orthoklas geplant. Um zu prüfen, ob die synthetisierte Mineralphase den Ansprüchen des Projektes entspricht, werden XRD-Analysen durchgeführt. Zusätzlich sind Leaching Experimente und ein HF-Aufschluss denkbar.

AP7: Es ist ein Arbeitstreffen in Dresden bei dem Partner HZDR IRE geplant.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Institut für Nukleare Entsorgung, Karlsruher Institut für Technologie, Hermann-von-Helmholtz-Platz 1, 76344 Eggenstein-Leopoldshafen		Förderkennzeichen: 02 E12052C
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Konkurrenz und Reversibilität bei Sorptionsvorgängen (KuRSiv), Teilprojekt C		
Zuordnung zum FuE-Programm: FuE-Bereich C1 Standortauswahl; FuE-Felder C1.1 Geowissenschaftliche und geotechnische Methoden zur Standorterkundung (Feld und Labor), C1.2 Charakterisierung des Geosystems und Geosynthese, C1.3 Methodische Grundlagen eines Standortvergleichs		
Laufzeit des Vorhabens: 01.01.2023 bis 30.06.2026	Berichtszeitraum: 01.01.2023 bis 30.06.2023	
Gesamtkosten des Vorhabens: 473.763,00 EUR	Projektleiter: Dr. Johannes Lützenkirchen	

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Das Verbundprojekt KuRSiv (Partner: Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Braunschweig, und Institut für Nukleare Entsorgung des KIT (KIT-INE)) untersucht die Rückhaltung von Radionukliden (RN) an Mineralphasen in Gegenwart von Aluminium und anderen Metallkationen, die aus der Auflösung der Minerale entstehen. Der Schwerpunkt der experimentellen Arbeiten ist zum einen auf das Verständnis der Nukleation, dem ersten Schritt in der Bildung von Mineralphasen, gerichtet. Weiterhin soll die Sorption der RN z.B. aufgrund von Auflösung der Mineralphasen als kompetitiver Prozess mit Metallionen aus der Mineralauflösung oder generell dem Porenwasser beschrieben werden, die mit den RN um Sorptionsplätze konkurrieren. In Kombination soll KuRSiv die für eine realistische Beschreibung der RN-Rückhaltung in hochkomplexen Systemen notwendigen Modelle bereitstellen inklusive einer realistischen Parametrisierung. Dies soll die Vorhersagequalität und Praktikabilität entsprechender Modellierungen erhöhen und damit das Vertrauen der Öffentlichkeit, der wissenschaftlichen Gemeinschaft und der Aufsichtsbehörden in solche Vorhersagen stärken.

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

- AP 1: State-of-the-Art: Bewertung
- AP 2: Kompetitive Effekte
- AP 3: Oberflächenausfällungen
- AP 4: Oberflächenpotential und –ladung (ohne direkte HZDR-Beteiligung)
- AP 5: Thermodynamische Daten & Modell
- AP 6: Proof-of-Concept
- AP 7: Koordination, Wissenstransfer

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Bisher wurden noch keine signifikanten Arbeiten durchgeführt, da noch kein Personal eingestellt wurde. Die Beschaffung der QCM wurde initiiert und das Gerät bestellt. Es soll noch im Laufe 2023 installiert und in Betrieb genommen werden.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP2: Ladungs-Charakterisierung von Glimmern, Al-freien Feldspäten und Quarz.

AP4: Inbetriebnahme der QCM. Einarbeitung des Post-Docs (experimentelle Arbeiten: Strömungspotential) und Test der Zelle für Strömungspotentialmessungen an QCM-Proben.

AP5: Literatur-Recherche zu aktuellen Arbeiten bzgl. Oberflächenausfällung.

5. Berichte, Veröffentlichungen

keine

Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer: Technische Universität Darmstadt, Institut für Angewandte Geowissenschaften, Fachgebiet Ingenieurgeologie, Schnittspahnstraße 9, 64287 Darmstadt		Förderkennzeichen: 02 E 12062A
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Spannungsprognosen – Quantifizierung und Reduzierung von Ungewissheiten mit geomechanisch-numerischen Untergrundmodellen (SQuaRe) Teilprojekt A: Ungewissheiten durch Materialparameter, Diskretisierung, Initial- und Randbedingungen		
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerforschung (C), insb. FuE-Feld C1.1		
Laufzeit des Vorhabens: 01.01.2023 bis 31.12.2025	Berichtszeitraum: 01.01.2023 bis 30.06.2023	
Gesamtkosten des Vorhabens: 258.500,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Andreas Henk	

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Robuste Prognosen zum Spannungszustand in der Erdkruste sind zur Charakterisierung potenzieller Standorte für die Endlagerung hochradioaktiver Abfälle von zentraler Bedeutung. Zur Einschätzung des Vertrauensbereiches geomechanisch-numerischer Modelle ist auch eine Angabe der Ungewissheiten in den prognostizierten Spannungsmagnituden und -orientierungen erforderlich. Für alle Komponenten des Spannungstensors müssen daher Wertebereiche mit den entsprechenden Wahrscheinlichkeiten angegeben werden. Dies setzt eine systematische Quantifizierung der Ungewissheiten der in die Modellierung eingehenden Parameter wie Untergrundgeometrie, Materialkennwerte, Randbedingungen und der zur Kalibrierung verwandten Spannungsdaten voraus. Im Rahmen des SQuaRe-Projektes wird die Expertise der Verbundpartner in geomechanisch-numerischer Modellierung, Interpretation von Spannungsindikatoren und Angewandter Statistik kombiniert. Dies erlaubt eine umfassende quantitative Betrachtung der Ungewissheiten von Spannungsprognosen, die sowohl für eine Standortcharakterisierung als auch für einen Standortvergleich verwandt werden können. Während für die Entwicklung des Arbeitskonzeptes und der Modellierungswerkzeuge ein generisches Referenzmodell genutzt wird, erfolgt der Nachweis der allgemeinen Anwendbarkeit in einer Fallstudie an einem realen Datensatz aus der Nordschweiz.

Die Vorhabensbeschreibung bezieht sich auf das Projektförderprogramm des BMWi zur Sicherheitsforschung für kerntechnische Anlagen (2021-2025). Das Vorhaben ist im FuE-Gebiet C – Endlagerforschung bzw. insbesondere im FuE-Bereich C1 – Standortauswahl angesiedelt. Die Arbeiten sind im Wesentlichen dem FuE-Feld C1.1 Geowissenschaftliche und geotechnische Methoden zur Standorterkundung mit dem FuE-Thema Felsmechanik zuzuordnen. Aufgrund der ausgeprägten methodischen Aspekte des Vorgabens, die u.a. für einen Standortvergleich genutzt werden können, bestehen aber auch Beziehungen zu dem FuE-Feld C1.2 Charakterisierung des Geosystems und Geosynthese (FuE-Thema Weiterentwicklung der Verfahren zur Modellierung des Geosystems), zu dem FuE-Feld C1.3 Methodische Grundlagen eines Standortvergleichs (FuE-Thema Grundlagen für den Vergleich von Endlagersystemen) sowie zu dem FuE-Feld C3.2 Methodische Grundlagen der Nachweisführung (FuE Thema Methodik zum Umgang mit Ungewissheiten) des FuEBereiches C3 – Sicherheitsnachweis.

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

Die Arbeiten sind auf fünf Arbeitspakete (AP) entsprechend der spezifischen Expertise der drei Projektpartner verteilt. Das Arbeitspaket AP1, an dem alle mitarbeiten, bildet den Rahmen der Arbeitspakete AP2-AP4, in denen jeweils Teilaspekte der Ungewissheiten eines geomechanisch-

numerischen Modells betrachtet werden. AP1 dient zur Integration der verschiedenen Modellierungskonzepte zur Quantifizierung der gesamten Modellungsgewissheiten und zur Entwicklung von geeigneten Beprobungsstrategien zu deren Reduzierung. AP2 an der RWTH Aachen fokussiert auf die Ungewissheiten in den geologischen Strukturen, d.h. auf die Modellgeometrie. AP3 an der TU Darmstadt untersucht den Einfluss durch die räumliche Verteilung der Gesteinseigenschaften, die Rechengitterauflösung sowie die Initial- und Randbedingungen. AP4 am GFZ Potsdam konzentriert sich auf den Einfluss der Modellkalibrierungsdaten. In der finalen Projektphase erfolgt in AP5 eine Validierung des Modellierungskonzeptes und der entwickelten Modellierungswerkzeuge aus AP1-AP4 in Form einer Fallstudie an einem realen Datensatz und einem hoch aufgelösten Modell aus der Nordschweiz. An AP5 arbeiten ebenfalls alle Projektpartner gemeinsam.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Der Projektbeginn verzögerte sich aufgrund von Schwierigkeiten bei der Personalfindung. Nach der erfolgreichen Besetzung der Mitarbeiterstelle durch Dr. Karsten Reiter konnte jedoch ein Teil des Zeitverzuges bereits aufgeholt werden. Bei dem Kickoff-Meeting des Projektes Anfang Mai 2023 in Aachen wurde gemeinsam mit den anderen Arbeitsgruppen die Geometrie des generischen Referenzmodells für AP1 festgelegt. Weiterhin wurde sich darüber verständigt, welche Bereiche von Materialeigenschaften und Randbedingungen für das Referenzmodell Verwendung finden sollen, sowie mit welchen FEM-Solvern die Berechnungen durchgeführt werden. Basierend auf der angestimmten Modellgeometrie wurde ein variabel einsetzbares Rechengitter (Mesh) erstellt. Dazu wurden erste Tests zur Auflösung durchgeführt. Es konnte festgelegt werden, welche Mesh-Auflösung das Referenzmodell haben kann, unter Beachtung der notwendigen Auflösung, aber auch vorhandener Lizenzen und entsprechender Rechengeschwindigkeit, so dass in überschaubarer Zeit eine ausreichende Anzahl an Versuchen durchgeführt werden kann. Erste Modellierungsergebnisse belegen bereits das grundsätzliche Potential der Reduced Basis Methode zur Quantifizierung der Ungewissheiten in den Materialeigenschaften und Randbedingungen für die Spannungsprognose, während Ungewissheiten in der Untergrundgeometrie einen erheblichen Rechenaufwand erfordern.

4. Geplante Weiterarbeiten

Im zweiten Halbjahr 2023 wird der Fokus entsprechend der Zielsetzung von AP 3 auf zwei Schwerpunkten liegen: Dem Einfluss von Materialparametern und der Auflösung des Rechengitters für geomechanische Modelle. Unter Nutzung der Referenzmodells werden Tests mit unterschiedlichen Materialeigenschaften durchgeführt. Anhand dessen soll untersucht werden, welchen Einfluss die Unsicherheiten bei der Definition von Materialparametern auf das resultierende Spannungsfeld haben. Begleitet wird dies von einer Literaturrecherche über die Aufskalierungseffekte von Gesteinsparametern aus dem Labor im Vergleich zu repräsentativen Gebirgskennwerten. Ferner soll, auch anhand von geometrisch komplexeren 2-D und 3-D Modelle, untersucht werden, welchen Einfluss eine unterschiedliche Diskretisierung bzw. Elementgröße auf das Rechenergebnis hat. Dies beinhaltet auch Tests bezüglich der verschiedenen Strategien zur Mesherstellung.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Da die Arbeiten an dem Projekt erst vor wenigen Monaten begonnen haben, liegen bisher noch keine Berichte oder Veröffentlichungen vor.

Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer: Helmholtz Zentrum Potsdam Deutsches GeoForschungsZentrum GFZ, Telegrafenberg, 14473 Potsdam		Förderkennzeichen: 02 E 12062B
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Spannungsprognosen – Quantifizierung und Reduzierung von Ungewissheiten mit geomechanisch-numerischen Untergrundmodellen (SQuaRe) Teilprojekt B: Bayesischer Ansatz zur Kalibrierung geomechanisch-numerischer Modelle mit Reduzierung der Ungewissheiten		
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerforschung (C), insb. FuE-Feld C1.1		
Laufzeit des Vorhabens: 01.01.2023 bis 31.12.2025	Berichtszeitraum: 01.01.2023 bis 30.06.2023	
Gesamtkosten des Vorhabens: 366.885,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Oliver Heidbach	

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Robuste Prognosen zum Spannungszustand in der Erdkruste sind zur Charakterisierung potenzieller Standorte für die Endlagerung hochradioaktiver Abfälle von zentraler Bedeutung. Zur Einschätzung des Vertrauensbereiches geomechanisch-numerischer Modelle ist auch eine Angabe der Ungewissheiten in den prognostizierten Spannungsmagnituden und -orientierungen erforderlich. Für alle Komponenten des Spannungstensors müssen daher Wertebereiche mit den entsprechenden Wahrscheinlichkeiten angegeben werden. Dies setzt eine systematische Quantifizierung der Ungewissheiten der in die Modellierung eingehenden Parameter wie Untergrundgeometrie, Materialkennwerte, Randbedingungen und der zur Kalibrierung verwandten Spannungsdaten voraus. Im Rahmen des SQuaRe-Projektes wird die Expertise der Verbundpartner in geomechanisch-numerischer Modellierung, Interpretation von Spannungsindikatoren und Angewandter Statistik kombiniert. Dies erlaubt eine umfassende quantitative Betrachtung der Ungewissheiten von Spannungsprognosen, die sowohl für eine Standortcharakterisierung als auch für einen Standortvergleich verwandt werden können. Während für die Entwicklung des Arbeitskonzeptes und der Modellierungswerkzeuge ein generisches Referenzmodell genutzt wird, erfolgt der Nachweis der allgemeinen Anwendbarkeit in einer Fallstudie an einem realen Datensatz aus der Nordschweiz.

Die Vorhabensbeschreibung bezieht sich auf das Projektförderprogramm des BMWi zur Sicherheitsforschung für kerntechnische Anlagen (2021-2025). Das Vorhaben ist im FuE-Gebiet C – Endlagerforschung bzw. insbesondere im FuE-Bereich C1 – Standortauswahl angesiedelt. Die Arbeiten sind im Wesentlichen dem FuE-Feld C1.1 Geowissenschaftliche und geotechnische Methoden zur Standorterkundung mit dem FuE-Thema Felsmechanik zuzuordnen. Aufgrund der ausgeprägten methodischen Aspekte des Vorhabens, die u.a. für einen Standortvergleich genutzt werden können, bestehen aber auch Beziehungen zu dem FuE-Feld C1.2 Charakterisierung des Geosystems und Geosynthese (FuE-Thema Weiterentwicklung der Verfahren zur Modellierung des Geosystems), zu dem FuE-Feld C1.3 Methodische Grundlagen eines Standortvergleichs (FuE-Thema Grundlagen für den Vergleich von Endlagersystemen) sowie zu dem FuE-Feld C3.2 Methodische Grundlagen der Nachweisführung (FuE Thema Methodik zum Umgang mit Ungewissheiten) des FuE Bereiches C3 – Sicherheitsnachweis.

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

Die Arbeiten sind auf fünf Arbeitspakete (AP) entsprechend der spezifischen Expertise der drei Projektpartner verteilt. Das Arbeitspaket AP1, an dem alle mitarbeiten, bildet den Rahmen der Arbeitspakete AP2-AP4, in denen jeweils Teilaspekte der Ungewissheiten eines geomechanisch-

numerischen Modells betrachtet werden. AP1 dient zur Integration der verschiedenen Modellierungskonzepte zur Quantifizierung der gesamten Modellungsgewissheiten und zur Entwicklung von geeigneten Beprobungsstrategien zu deren Reduzierung. AP2 an der RWTH Aachen fokussiert auf die Ungewissheiten in den geologischen Strukturen, d.h. auf die Modellgeometrie. AP3 an der TU Darmstadt untersucht den Einfluss durch die räumliche Verteilung der Gesteinseigenschaften, die Rechengitterauflösung sowie die Initial- und Randbedingungen. AP4 am GFZ Potsdam konzentriert sich auf den Einfluss der Modellkalibrierungsdaten. In der finalen Projektphase erfolgt in AP5 eine Validierung des Modellierungskonzeptes und der entwickelten Modellierungswerkzeuge aus AP1-AP4 in Form einer Fallstudie an einem realen Datensatz und einem hoch aufgelösten Modell aus der Nordschweiz. An AP5 arbeiten ebenfalls alle Projektpartner gemeinsam.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Der Projektbeginn verzögert sich aufgrund von Schwierigkeiten bei der Personalfindung. Eine erste Ausschreibung der Doktorandenstelle war nicht erfolgreich, da die auf Platz 1 gesetzte Kandidatin letztendlich wieder abgesprungen ist und die Kandidatin auf Platz 2 in der Zwischenzeit an anderer Stelle ein Angebot angenommen hatte. Die zweite Ausschreibungsrunde wurde gerade abgeschlossen und zwei sehr gute KandidatInnen ausgewählt. Wir gehen davon aus, dass wir in Kürze einen Vertrag abschließen können und die Arbeiten dann mit Nachdruck vorangebracht werden.

Im Rahmen des Kickoff-Meetings für das Projekt, das Anfang Mai 2023 in Aachen durchgeführt wurde haben wir gemeinsam mit den anderen Arbeitsgruppen die Geometrie des generischen Referenzmodells für AP1 sowie das Rechengitter, also die Diskretisierung in Finite Elemente, festgelegt. Ebenfalls wurden die Ranges der Materialeigenschaften und Randbedingungen für das Referenzmodell definiert. Das relativ einfache Modell dient der Entwicklung und Validierung von Methoden, die in jeweiligen APs der Teilprojekte bearbeitet werden sollen. Erste Modellierungsergebnisse zeigen das grundsätzliche Potential der Reduced Basis Methode zur Quantifizierung der Ungewissheiten in den Materialeigenschaften und Randbedingungen für die Spannungsprognose, während Ungewissheiten in der Untergrundgeometrie einen erheblichen Rechenaufwand erfordern. Ebenfalls wurde auf dem kick-off Meeting festgelegt, dass wir für das generische Testmodell mit dem FE-Solver Moose arbeiten, da dies in der Rechengeschwindigkeit Vorteile bringt aufgrund der vollständigen Parallelisierung des Codes und seiner freien Verfügbarkeit.

4. Geplante Weiterarbeiten

Im zweiten Halbjahr wird der Fokus auf der Einarbeitung der Doktorandin liegen und eine grundlegende Abschätzung wie die Ungewissheiten in den Modellkalibrierungsdaten (Daten zu den Magnituden der kleinsten und größten Horizontalspannung) in die Ungewissheit der Modellprognose beitragen. Wir wollen ebenfalls untersuchen wie und ob indirekte Spannungsdaten mit in die Modellkalibrierung einfließen können. Dabei wollen wir untersuchen, ob eine Kalibrierung an Punktdaten zielführend ist, oder ob nicht die Wahrscheinlichkeitsverteilung im Lösungsraum unter Berücksichtigung von weiteren indirekten Spannungsinformationen eine robustere und effizientere Methode ist.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Bisher liegen noch keine Berichte oder Veröffentlichungen vor.

Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer: RWTH Aachen University		Förderkennzeichen: 02 E 12062C
Vorhabensbezeichnung: Spannungsprognosen – Quantifizierung und Reduzierung von Ungewissheiten mit geomechanischnumerischen Untergrundmodellen (SQuaRe) – Teilprojekt C		
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerforschung (C), insb. FuE-Feld C1.1		
Laufzeit des Vorhabens: 01.12.2022 bis 30.11.2025	Berichtszeitraum: 31.01.2023 bis 30.06.2026	
Gesamtkosten des Vorhabens: 244.990,00 EUR	Projektleiter: Jan Florian Wellmann	

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Robuste Prognosen zum Spannungszustand in der Erdkruste sind zur Charakterisierung potentieller Standorte für die Endlagerung hochradioaktiver Abfälle von zentraler Bedeutung. Zur Einschätzung des Vertrauensbereiches geomechanisch-numerischer Modelle ist auch eine Angabe der Ungewissheiten in den prognostizierten Spannungsmagnituden und -orientierungen erforderlich. Für alle Komponenten des Spannungstensors müssen daher Wertebereiche mit den entsprechenden Wahrscheinlichkeiten angegeben werden. Dies setzt eine systematische Quantifizierung der Ungewissheiten der in die Modellierung eingehenden Parameter wie Untergrundgeometrie, Materialkennwerte, Randbedingungen und der zur Kalibrierung verwandten Spannungsdaten voraus. Im Rahmen des SQuaRe-Projektes wird die Expertise der Verbundpartner von TU Darmstadt, GFZ Potsdam und RWTH Aachen in geomechanischnumerischer Modellierung, Interpretation von Spannungsindikatoren und Angewandter Statistik kombiniert. Dies erlaubt eine umfassende quantitative Betrachtung der Ungewissheiten von Spannungsprognosen, die sowohl für eine Standortcharakterisierung als auch für einen Standortvergleich verwandt werden können. Während für die Entwicklung des Arbeitskonzeptes und der Modellierungswerkzeuge ein generisches Referenzmodell genutzt wird, erfolgt der Nachweis der allgemeinen Anwendbarkeit in einer Fallstudie an einem realen Datensatz aus der Nordschweiz.

Die Arbeiten an der RWTH Aachen zielen insbesondere auf die Untersuchung des Einflusses von geometrischen Parametern und der Erstellung von Ersatzmodellen mittels Methoden der künstlichen Intelligenz. Darüber hinaus wird gemeinsam mit den anderen Verbundpartnern das generische Referenzmodell und die Fallstudie aus der Nordschweiz bearbeitet.

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

Die RWTH Aachen arbeitet gemeinsam mit den Verbundpartner in AP 1 zur Definition eines generischen Referenzmodells, das als integrierte Modellierungs- und Simulationsplattform für alle Arbeitsgruppen fungiert, ferner in AP 5 an der Validierung des Modellierungskonzeptes und der entwickelten Modellierungswerkzeuge anhand eines realen Datensatzes aus der Nordschweiz. Der Schwerpunkt der

Arbeiten liegt in AP 2 mit der systematischen Betrachtung von geometrischen Parametern auf die Ungewissheiten einer Spannungsprognose. Unter Verwendung des open-source Softwarepaketes GemPy werden einfache geologische Modelle erstellt und mit Hilfe weiterer open-source Pakete diskretisiert um dann für Spannungsprognosen verwendet werden zu können. Es wird untersucht

welche Art von geometrischen Ungewissheiten den größten Einfluss auf die Spannungsprognosen hat. Desweiteren werden Ersatzmodelle mit Hilfe eines physikbasierten maschinellen Lernansatzes erstellt, um die Berechnung der Ungewissheiten der Spannungsprognosen zu ermöglichen. Dieser Schritt ist notwendig, da die einzelnen Simulationen eine zu lange Laufzeit haben um eine Ungewissheitsanalyse durchzuführen. In diesem Schritt liegt der Hauptfokus auf der Anwendung und Entwicklung von Methoden, die die physikalischen Eigenschaften der Modelle erhalten.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im Projekt ist bisher die Implementierung der nicht-intrusiven reduzierten Basismethode für Spannungssimulationen erfolgt. Zur Überprüfung der Effizienz dieser Ersatzmodelle ist ein vereinfachtes Referenzmodell verwendet wurden. Für dieses Modell wurden Ersatzmodelle generiert die getrennt die Unsicherheiten für Geometrie, Materialeigenschaften und Grenzbedingungen berücksichtigen. Sämtliche Ersatzmodelle konnten erfolgreich generiert werden, wobei sich Besonderheiten für die Geometrie ergeben.

4. Geplante Weiterarbeiten

In den nächsten Schritten soll die Komplexität des Modelles erhöht werden, um die Anwendung der Ersatzmodelle für reale Fallstudien zu ermöglichen. Des Weiteren soll die Einbindung der jetzigen und zukünftigen Ersatzmodelle in globale Sensitivitätsstudien und probabilistische Unsicherheitsanalysen erfolgen. Dies dient zur Quantifizierung von Unsicherheiten und besseren Vorhersagen der Spannungszustände im Endlagerbereich. Ein weiteres Ziel dieser Verfahren ist es zu bestimmen welche Unsicherheitsquellen die größten Einflüsse auf die Prognosen haben.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Im Zuge des Projektes sind bisher noch keine Veröffentlichungen entstanden. Die Arbeiten sind in einem Vortrag auf der SIAM GS 23 vorgestellt wurden.

Zuwendungsempfänger: Technische Universität Bergakademie Freiberg, Akademiestr. 6, 09599 Freiberg	Förderkennzeichen: 02 E 12072A
Vorhabensbezeichnung: MgO-Beton C3 als langzeitbeständiges und schnellwirksames Verschlusselement für Schachtverschlüsse zukünftiger HAW-Endlager im Salinar (MgO-C3), Teilprojekt A	
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Endlagerforschung Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte; Endlagertechnik und (geo-)technische Barrieren; Feld C2.3	
Laufzeit des Vorhabens: 01.12.2022 bis 30.11.2025	Berichtszeitraum: 01.01.2023 bis 30.06.2023
Gesamtkosten des Vorhabens: 694.407,00 EUR	Projektleiter: Dr. Daniela Freyer

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Im Rahmen des Sicherheitsnachweises zur Integrität eines HAW-Endlagers wird für die rechen-technische Bewertung eines potentiellen Lösungszutritts und der damit potentiell verbundenen Freisetzung von Radionukliden über die verschlossenen Schächte bisher immer nur der Einbauzustand der geotechnischen Barriere mit einer integralen Permeabilität von $> 10^{-17} \text{ m}^2$ betrachtet. Dieser hohe Wert ergibt sich im Salinar vor allem über die immer vorhandene Auflockerungszone, die sich infolge des Aufkriechens des Salzgebirges nur langsam schließt. Von einer schnellen und auch gleichzeitig langanhaltenden Permeabilitätsverringern, bewirkt durch Schachtverschlusselemente, wie mit dem Einbau einer entsprechenden MgO-Baustoffrezeptur (effektive Abdichtung der ALZ über die schnelle und langanhaltende Expansionsdruckentwicklung des Baustoffs), wird bei der Nachweisführung bisher kein Kredit genommen. Dass dieses Potential mit der MgO-Betonrezeptur C3 (3-1-8-Rezepturtyp) besteht, zeigen die Ergebnisse des abgeschlossenen FuE-Projektes ELSA II anhand von zwei in-situ-Großbohrlochversuchen. Zum bisher erreichten Kenntnisstand sind offene Fragestellungen und damit Vorhabensziele die

- Verifizierung des langanhaltenden Kontaktdruckes und der damit verbundenen Permeabilitätsabnahme für das Gesamtsystem, d.h. Fortsetzung des in-situ-Großbohrlochversuch-Monitorings in der Grube Teutschenthal;
- Verständnisentwicklung zur vermuteten Wirkung des Zuschlaganteils Hartgestein auf Expansionsdruckentwicklung/-verbleib und Relaxationsverhalten des C3-Betons gegenüber anderen 3-1-8-Rezepturtypen (A1, DBM2, C3-Zement); dabei Substitution der Rezepturkomponente Quarzmehl unter Erhalt des langzeitlichen Kontaktdruckverhaltens;
- Ermittlung einer geomechanischen Datenbasis, u.a. Festigkeits- und Permeabilitätsverhalten sowie Kompaktionseigenschaften für die Prognose der Langzeitwirkung des C3-Beton-Dichtelements.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP1: Weiterer Verlauf der Kontaktdruckentwicklung

AP2: Untersuchung der Schwankungsbreite der C3-Rezeptur

AP3: Neuformulierung der Rezeptur

AP4: Berichtserstellung

Die Arbeitspakete 2, 3 und 4 werden gemeinschaftlich unter Beteiligung des Verbundpartners HZDR bearbeitet.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1: Fortsetzung des in-situ-Großbohrlochversuch-Monitorings in der Grube Teutschenthal (alle Spannungen, Temperatur, Standortfeuchte); Übernahme des Monitorings der TUBAF-Messanlage durch das IfG; Beendigung des seit 2019 laufenden begleitenden Laborzellen-Monitorings aus dem bereits 2020 abgeschlossenen FuE-Projektes ELSA II mit Nach-Controlling der DMS-Applikation der Druckmesszellen und Probengewinnung für erste Messungen am HZDR

- AP2: Beschaffung und Charakterisierung aller Rezepturkomponenten (MgO-LW: Phasenbestand mittels PXRD, Zitronensäuretest; MgCl₂-Lösung: nasschemische Analyse; Zuschlag: Phasenbestand, Korngrößenverteilung, Schüttdichte); umfangreiche Laborversuche zur C3-Rezeptur“überführung“ bzgl. der MgO-LW (vom ursprünglichen Lieferanten Lehmann & Voss zu Styromag) sowie zur Rezepturvariation (Variation des Kies- bzw. Quarzmehlanteils) mit abschließender Festlegung der 4 Rezepturvarianten (R1 – R4) mit zunehmendem Sand/Kies-Anteil von R1 zu R4 für das in Planung befindliche Labor-Monitoring-Programm; Fertigung von 50 kleinen gasdichten Stahlzellen zur Verfolgung der Phasenbestandsentwicklung sowie 40 große Messzellen (davon 25 Druckmesszellen) für Verfolgung der Druckentwicklung und Gewinnung von Bohrkernen zur Ermittlung mech. Parameter in Abhängigkeit vom Abbindezeitfenster für R1 – R4
- AP3: Beschaffung und Charakterisierung von drei Anhydrit-Muster-Proben, erste Laborversuche zur Rezepturanpassung (Substitution des Quarzmehls in der bisherigen C3-Rezeptur)

4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1: Fortsetzung des in-situ-Großbohrlochversuch-Monitorings (alle Spannungen, Temperatur, Standortfeuchte); Beschaffung eines neuen Datenloggers zur Sicherstellung des langfristigen kontinuierlichen Monitorings durch das IfG.
Für die geplante Lösungsdruckbeaufschlagung wird ein neuer Packer gesetzt.
- AP2: Zellenbefüllung für schrittweisen Start des Labor-Monitoring-Programms (Druck, Phasenbestand, Temperatur) der 4 Rezepturvarianten an zwei Anmisch- und Befüllterminen (für TZF40 bzw. TZF70)
- AP3: Festlegung der Rezeptur mit Anhydrit mit Sand-/Kieszuschlag (R3- oder R4-analog); Zellenbefüllung für Start des Labor-Monitoring-Programms (Druck, Phasenbestand, Temperatur) analog AP2

5. Berichte, Veröffentlichungen

- keine

Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer: Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e.V., Bautzner Landstr. 400, 01328 Dresden		Förderkennzeichen: 02 E 12072B
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: MgO-Beton C3 als langzeitbeständiges und schnellwirksames Verschluss- element für Schachtverschlüsse zukünftiger HAW-Endlager im Salinar (NgO-C3), Teilprojekt B		
Zuordnung zum FuE-Programm: Forschungsförderung zur nuklearen Sicherheit C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte; Endlagertechnik und (geo-)technische Barrieren mit dem FuE-Feld C2.3 Geotechnische und technische Barrieren		
Laufzeit des Vorhabens: 01.12.2022 bis 30.11.2025	Berichtszeitraum: 01.01.2023 bis 30.06.2023	
Gesamtkosten des Vorhabens: 36.856,00 EUR	Projektleiter: Dr. Johannes Kulenkampff	

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Als eines von möglichen Schachtverschlusselementen in Salzformationen eignet sich der MgO-Baustoff der Rezeptur C3 besonders, weil abhängig von der Rezepturvariante eine sofortige Permeabilitätsabnahme des Gesamtsystems über den Aufbau eines schnell wirksamen und langanhaltenden Kontaktdruckes erreicht werden kann. Untersuchungen zur MgO-Betonrezeptur C3 mit Fortsetzung des bestehenden untertägigen in-situ-Monitorings zusammen mit einem komplexen Untersuchungsprogramm zum Nachweis sowie der Verständniserwicklung zur Aufrechterhaltung des langanhaltenden Kontaktdruckes in Abhängigkeit von den Rezepturkomponenten und deren möglicher Schwankungsbreite ist Gegenstand dieses Verbundvorhabens.

Das Teilprojekt des HZDR soll das Gefüge des Zuschlagskorngerüsts analysieren und zur Klärung seines Einflusses auf die Kontaktdruckentwicklung dienen.

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

Hauptvorhaben:

- AP1: Kontaktdruckentwicklung.
- AP2: Schwankungsbreite der C3-Rezeptur.
- AP3: Neuformulierung der Rezeptur.
- AP4: Berichtserstellung.

Im Teilprojekt des HZDR werden im Rahmen der AP 2 und 3 tomographische Aufnahmen von Prüfkörpern erstellt und bezüglich ihres Gefüges analysiert, insbesondere in Hinblick auf das Kontaktverhalten des Korngerüsts.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP2.2 μ CT-Untersuchung der Zuschlagskomponenten: Optimierung der Aufnahmeparameter, Segmentierung, Kornverteilung, Kornform

4. Geplante Weiterarbeiten

AP2.2 Algorithmusentwicklung zur Korn-Korn-Koordination

AP2.5 μ CT-Untersuchungen an MgO-C3-Proben, sobald Prüfkörper zur Verfügung stehen

5. Berichte, Veröffentlichungen

keine

Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer: Leibniz Universität Hannover (LUH), Institut für Werkstoffkunde		Förderkennzeichen: 02 E 12092
Vorhabensbezeichnung: Recherche und Beschreibung für das Endlagerbehältersystem in Frage kommende Materialien (ElaBeMa)		
Zuordnung zum FuE-Programm: Projektförderprogramm des Bundesministeriums für Wirtschaft und Energie zur Sicherheitsforschung für kerntechnische Anlagen 2021–2025		
Laufzeit des Vorhabens: 01.01.2023 bis 31.12.2023	Berichtszeitraum: 01.01.2023 bis 30.06.2023	
Gesamtkosten des Vorhabens: 109.102,00 EUR	Projektleiter: Dr.-Ing. Thomas Hassel	

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Im fortschreitenden Standortauswahlverfahren stellen sich vermehrt Fragen nach der technischen Barriere zur Beschreibung und Entwicklung des Entsorgungspfades. Viele dieser Fragen sind bisher nicht beantwortbar, da die für die Antworten notwendigen Ausgangsbedingungen, noch nicht definierbar sind.

Ziel ist es, für das Gesamtsystem Endlagerbehälter wirtsgesteinsübergreifend zu recherchieren, welche Materialien in Bezug auf die an die Behälter zu stellenden Anforderungen in Frage kommen können und die Recherche auf die derzeitigen ingenieurtechnischen Werkstoffentwicklungen zu erweitern. Projektziel ist eine umfassende Abhandlung als Überblick über die An- und Verwendung von Materialien im Bereich der Verwendung im Endlagerbehältersystem. Es erfolgt eine Erarbeitung einer klaren Informationsstruktur zur strukturierten Darstellung der Vor- und Nachteile betrachteter Materialien. Fokus der Arbeiten liegt dabei auf der Forderung Informationen zu Behältermaterialien zu erarbeiten, welche möglichst das Endlagerbehältersystem für alle Wirtsgesteinsarten qualifizieren und einen starken Bezug zu Fragen der Verfügbarkeit und Herstellbarkeit, also der Produktionstechnik, tragen.

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

1. Literaturrecherche und Auswertung zu Behältermaterialien

1.1. Recherche Werkstoffsysteme

Dabei wird systematisch der Ansatz zugrunde gelegt, dass die Materialien sowohl eine konstruktive, als auch eine Barrierefunktion haben sollten. Damit werden hier Informationen zusammengetragen, welche sich nicht nur auf das dickwandige Behältermaterial beschränken, sondern sowohl im Behälterinneren, als auch als Behälterbeschichtungsmaterial außen eine Einsatzperspektive bieten können.

1.2. Recherche Produktionstechnik

Im Weiteren Arbeitsablauf werden die recherchierten Werkstoffsysteme in Bezug zur Produktionstechnik gesetzt und es wird ermittelt ob und in welcher Form die Verfügbarkeit und die Herstellbarkeit zur Anwendung im Endlagergebäude gegeben ist.

1.3. Recherche Einflussparameter

Die Recherche erweitert wird um die Einflussparameter erweitert, damit die Erfolgsperspektiven der Materialentscheidungen und Materialverortungen abgeschätzt werden können.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Mit dem Vorhaben ist noch nicht begonnen worden, da es Schwierigkeiten bei der Personalakquise gab und eine Einstellung eines wiss. Mitarbeiters erst für August 2023 in Aussicht steht.

4. Geplante Weiterarbeiten

Der Arbeitsplan soll ab August 2023 abgearbeitet werden. Es wird mit einem Antrag auf kostenneutrale Verlängerung gerechnet, da es nicht möglich erscheint die Arbeiten in der verbleibenden Restlaufzeit durchzuführen.

5. Berichte, Veröffentlichungen

keine

Zuwendungsempfänger: TU Clausthal - Lehrstuhl für Geomechanik und multiphysikalische Systeme		Förderkennzeichen: 02 E 12082
Vorhabensbezeichnung: Langzeitsicheres Abdichtungselement aus Salzschnittblöcken - Durchführung, Auswertung und Reanalyse von THM-Versuchen unter triaxialer Extensionsbeanspruchung (SSBVIER)		
Zuordnung zum FuE-Programm: Förderkonzept des Bundesministeriums für Wirtschaft und Energie: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle (2015-2018), Fördergebiete "3.2 - Endlagertechnik / Verfüll- und Verschlusskonzept"; "3.3 - Geotechnische Barrieren / technische Realisierbarkeit / Material und Komponenten"; "3.5 - Demonstrationsversuche".		
Laufzeit des Vorhabens: 01.01.2023 bis 31.12.2024	Berichtszeitraum: 01.01.2023 bis 30.06.2023	
Gesamtkosten des Vorhabens: 243.874,00 EUR	Projektleiter: apl. Prof. Dr.-Ing. habil. Uwe Düsterloh	

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Durchführung, Auswertung und numerisch-rechnerische Reanalyse von Technikumsversuchen an Großprüfkörpern aus Salzschnittblöcken mit und ohne Fugenfüllung zur Untersuchung der Dicht- und Tragwirkung des Systems unter in situ-relevanten THM-Belastungen. Bezug zu anderen Vorhaben: Für die Reanalyse von Abdichtungssystemen aus Salzschnittblöcken mit Fugenfüllung aus Salzgrus werden die im Rahmen des Forschungsvorhabens KOMPASS (02E11708D und 02E11951D) erarbeiteten Ergebnisse zur stoffmodelltheoretischen Charakterisierung von Salzgrus integriert.

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

- AP 1 Beschaffung von gewachsenem Steinsalz.
- AP 2 Herstellung von Salzschnittblöcken.
- AP 3 Durchführung und Auswertung von Technikumsversuchen unter variierten THM-Belastungen.
- AP 4 Rechnerische Reanalyse der Technikumsversuche mit Verifikation, Validation und Ertüchtigung / Erweiterung der Berechnungssoftware.
- AP 5 Erstellung Schlussbericht.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP2:

Herstellung der Salzschnittblöcke für einen vierten Prüfkörper (Durchmesser = 0,55 m und Höhe = 1,5 m) mit einer Fugenbreite von 0,1 mm (ohne Salzgrusfugenfüllung)

AP3:

Durchführung des dritten Prüfkörpertests mit der Konfiguration der Salzschnittblock-Konstruktion mit einer Fugenbreite von 5 mm und Salzgrusfugenfüllung: Durchführung der hydromechanischen Kompaktionsversuche unter nahezu isotropen Belastungsrandbedingungen mit konstanter Mantelspannung von 2 / 4,5 / 8,5 MPa und konstanter Axialspannung von 3 / 5 / 9 MPa bei gleichzeitiger Durchführung einer Gaspermeabilitätsuntersuchung mit verschiedenen Gasdruckgradienten.

AP4:

Prognostische Simulation für den Prüfkörper mit 0,1 m dicken Außenwandung (z.B. aus Salzbeton) um die Salzschnittblockkonstruktion (Durchmesser = 0,55 m, Höhe = 1,5 m und Fugenbreite = 5 mm) im Vergleich zu dem Prüfkörper mit der Salzschnittblockkonstruktion (Durchmesser = 0,75 m, Höhe = 1,5 m und Fugenbreite = 5 mm) ohne Außenwandung

AP5:

4. Geplante Weiterarbeiten

AP2:

Weitere Herstellung von Salzschnittblöcken für den vierten Prüfkörper (Durchmesser = 0,55 m und Höhe = 1,5 m) mit einer Fugenbreite von 0,1 mm (ohne Salzgrusfugenfüllung); Planung der Zusammensetzung für die 0,1 m dicke Außenwandung (z.B. aus Salzbeton) um die Salzschnittblockkonstruktion.

AP3:

Weitere Durchführung des dritten Prüfkörpertests mit Konfiguration der Salzschnittblock-Konstruktion mit einer Fugenbreite von 5 mm und Salzgrusfugenfüllung

AP4:

Prognostische Simulation für den Prüfkörper mit 0,1 m dicken Außenwandung (z.B. aus Salzbeton) um die Salzschnittblockkonstruktion (Durchmesser = 0,55 m, Höhe = 1,5 m und Fugenbreite = 0,1 mm)

AP5:

-

5. Berichte, Veröffentlichungen

Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer: TU Braunschweig, Postfach 3329, 38023 Braunschweig		Förderkennzeichen: 02 E 12102
Vorhabensbezeichnung: Entwicklung einer selbstlernenden Modellierungsmethodik zu geomechanischen und geotechnischen Prozessen am Beispiel der Planungs- und Auffahrungsphase einer Einlagerungsstrecke eines Tiefenlagers (SEMOTI)		
Zuordnung zum FuE-Programm: - Forschungsgebiet C: Endlagerung - FuE-Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte; Endlagertechnik und (geo-)technische Barrieren		
Laufzeit des Vorhabens: 01.05.2023 bis 30.04.2026	Berichtszeitraum: 01.01.2023 bis 30.06.2023	
Gesamtkosten des Vorhabens: 999.050,00 EUR	Projektleiter: Univ.-Prof. Dr.-Ing. J. Stahlmann	

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Die Projektpartner haben das Gesamtziel, eine auf dem maschinellen Lernen basierende Modellierungsmethodik für Tiefenlagersysteme zu entwickeln, mit der anhand eines Demonstrators „Einlagerungsstrecke mit Versatz und Verschlussbauwerk im Steinsalz“ ein Optimierungsprozess während der Planungsphase und ein Kalibrierungsprozess während der Auffahrungsphase im Bereich der geomechanischen und geotechnischen Fragestellungen ermöglicht wird.

Innerhalb des Optimierungsprozesses gilt es zunächst für den virtuellen Demonstrator (numerisches Modell) das bestmögliche Verschlussbauwerk unter Berücksichtigung der Streubreiten der Gebirgskennwerte und Materialeigenschaften sowie der Geometrie des Verschlussbauwerkes zu finden. Der Optimierungsprozess wird anhand des hydraulischen Widerstandes als Zielfunktion ausgewertet und hat die automatisierte Generierung eines optimalen Entwurfes einer Einlagerungsstrecke eines Tiefenlagers zum Ziel.

In der zweiten Projektphase wird die Auffahrungsphase betrachtet, in welcher der virtuelle Demonstrator mit Monitoringdaten mittels Modellkalibrierung zu einem Digital Twin eines Tiefenlagers erweitert wird. Da während des Optimierungs- und Kalibrierungsprozesses eine Vielzahl an numerischen Simulationen durchgeführt werden müssen, wird der virtuelle Demonstrator durch ein selbstlernendes Metamodell mittels Gaußprozessen repräsentiert.

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

Das Vorhaben besteht aus folgenden Arbeitspaketen. Die Grundlagen in Form einer Datenbank und eines parametrisierten virtuellen Demonstrators werden in AP 1-4 erstellt. Die Optimierungs- und Kalibrierungsprozesse werden in AP 5-7 untersucht.

AP1: Erstellen einer Datenbank zu Tiefenlagerkonzepten und Systemeigenschaften (Lead IGG)

AP2: Erstellen eines virtuellen Demonstrators (Lead IGG)

AP3: Parametrisierung des virtuellen Demonstrators (Lead IGG)

AP4: Maschinelles Lernen mittels Gaußprozessen (Lead IRMB,IDS)

AP5: Implementierung eines Optimierungsprozesses für die Planungsphase (Lead IDS)

AP6: Implementierung eines Kalibrierungsprozesses für die Auffahrungsphase (Lead IRMB)

AP7: Sensitivitätsbetrachtung (Lead IGG, IRMB, IDS)

AP8: Administrative Arbeiten

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Die insgesamt vier ausgeschriebenen Stellen des IGG, IRMB und IDS für wissenschaftliche Mitarbeiter konnten alle besetzt werden und die Mitarbeiter sind jetzt oder in naher Zukunft verfügbar.

Vom Institut für Geomechanik und Geotechnik (IGG) wurden Weblizenzen für die numerische Simulationssoftware FLAC3D9.0 (Itasca Consulting Group) beschafft, die dazu dient, komplexe geotechnische Fragestellungen mittels der Finite-Differenzen-Methode (FDM) zu lösen. Das verwendete Stoffmodell TUBSalt für Steinsalz sowie eine Vorlage einer Einlagerungsstrecke eines Tiefenlagers liegen in Form eines Codes vor.

Weiterhin haben die Mitarbeiter nun Zugriff auf den Universitäts-internen Hochleistungsrechner Phoenix-Cluster, mit dessen Hilfe ein effizienter Ablauf der Optimierungs- und Kalibrierungsprozesse gewährleistet werden kann. Ebenfalls wurde die verwendete Simulationssoftware FLAC3D vom Institut für rechnergestützte Modellierung im Bauingenieurwesen (IRMB) auf dem Phoenix-Cluster implementiert, sodass dort nun sogenannte „Jobs“ auf den Knoten gestartet werden können.

Die Institute IDS (Institut für Dynamik und Schwingungen) und IRMB haben Vorarbeiten zum Themenkomplex Gaußprozessregression durchgeführt, insbesondere zum Aspekt des aktiven Lernens – den sogenannten Infill Kriterien. Mit diesen werden adaptiv neue Simulationskonfigurationen ausgewählt, die einen maximalen Informationsgewinn versprechen. Infill Kriterien sind für die Aufgabe der Kalibrierung und Optimierung getrennt zu wählen und verschiedene Kandidaten wurden in ersten numerischen Tests implementiert und an einfachen Beispielen getestet.

4. Geplante Weiterarbeiten

In enger Zusammenarbeit zwischen den Instituten soll nun der Optimierungsprozess des virtuellen Demonstrators beginnen. Zu diesem Zweck wird von Seiten des IGG der virtuelle Demonstrator einer Einlagerungsstrecke eines Tiefenlagers in Steinsalz inklusive implementiertem Stoffmodell auf Grundlage eines bereits vorhandenen Modells angepasst und bereitgestellt. Es werden Modellparameter ausfindig gemacht, die die Zielfunktion der hydraulischen Integrität der geologischen und geotechnischen Barriere maßgeblich beeinflussen. Anhand derer finden dann erste Optimierungssimulationen statt, indem eine Vielzahl von Berechnungen auf dem Phoenix-Cluster zeiteffizient durchgeführt werden.

Das IDS und IRMB werden die unter Punkt 3 angesprochenen Gaußprozess-Methoden auf die Optimierungsaufgabe anwenden und somit ein Ersatzmodell des virtuellen Demonstrators erstellen. Dieses Ersatzmodell soll auf Basis der Infill Kriterien sequentiell durch weitere Simulationsdaten angereichert werden, bis eine hinreichende Güte für die Optimierungsaufgabe erreicht ist. Durch die Verwendung der Gaußprozesse wird die Optimierung recheneffizient und aufgrund der Komplexität des virtuellen Demonstrators überhaupt beherrschbar.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Fehlannonce.

Zuwendungsempfänger: Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e.V., Bautzner Landstrasse 400, 01328 Dresden		Förderkennzeichen: 02 E 12112A
Vorhabensbezeichnung: Systematic sensitivity analysis for mechanistic geochemical models using field data from crystalline rock (Teilprojekt HZDR im Verbundvorhaben SMILE)		
Zuordnung zum FuE-Programm: FuE-Bereich C3 Sicherheitsnachweis; FuE-Feld C3.1 Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-)Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung, FuE-Feld C3.3 Werkzeuge der Sicherheitsanalysen		
Laufzeit des Vorhabens: 01.02.2023 bis 31.01.2026	Berichtszeitraum: 01.02.2023 bis 30.06.2023	
Gesamtkosten des Vorhabens: 736.940,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Vinzenz Brendler	

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Das Verbundprojekt SANGUR (Partner: TU Clausthal, Institut für Endlagerforschung (TUC), und ÚJV Řež, a. s. als Unterauftragnehmer des HZDR) zielt auf ein verbessertes Verständnis und die Einbeziehung von Parameterunsicherheiten im Kontext der nuklearen Entsorgung. Es ebnet den Weg, um denkbare und vertretbare Fehlermargen für alle wichtigen Zielfunktionen innerhalb von Langzeitsicherheitsbewertungen zukünftiger Endlagersysteme in tiefen geologischen Formationen, hier kristallinen Gesteinen, zu gewinnen. Das Projekt baut auf einem umfassenden State-of-the-Art-Bericht (SOTA) über die derzeitige Behandlung von Ungewissheiten durch Sensitivitätsanalysen in geologischen Systemen aus mathematischer Sicht auf, der auch fortgeschrittene Softwareimplementierungen umfasst. Ergänzt wird dies durch eine gründliche Analyse der reaktiven Transportprozesse in kristallinem Gestein und die Ableitung entsprechender Modelle. In einem nächsten Schritt werden diese Modelle unter Einbeziehung realistischer Unsicherheiten parametrisiert. Parallel dazu wird der SOTA-Bericht genutzt, um eine Toolbox zu entwickeln, welche ausgewählte Algorithmen zur Sensitivitätsanalyse (SA) mit repräsentativen geochemischen Speziationscodes kombiniert. Die Ergebnisse all dieser Projektebenen werden dann anhand eines Testfalls bewertet. Schließlich werden eine Methodik zur Modellreduzierung sowie Prioritäten für die künftige Forschung abgeleitet.

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

- AP1: State-of-the-Art Bericht zur Sensitivitätsanalyse (ohne direkte Beteiligung HZDR)
- AP 2: Ableitung des reaktiven Transportmodells
- AP 3: Modellparametrisierung und Unsicherheiten
- AP 4: Prototyping einer Toolbox (ohne direkte Beteiligung HZDR)
- AP 5: Anwendung der Sensitivitätsanalyse auf einen Testfall
- AP 6: Modellreduktion und zukünftige Prioritäten
- AP 7: Projektleitung

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP2: Erfassung aller im Kristallin relevanten Prozesse, welche den Schadstofftransport beeinflussen (basierend auf OECD-NEA und EURAD-Reports, sowie eigener Recherchen zu Veröffentlichungen mit experimentellen Arbeiten)

Etablierung eines Workflows zur Berechnung von Verteilungskoeffizienten (smart K_d):

- Modul Lithologie: Review existierender geostatistischer Ansätze, Diskussion Anwendbarkeit graphenbasierter Modelle
- Modul Geochemie: erste Tests zur Eignung geochemischer Speziationcodes (PhreeqC; GWB) für den Workflow.

AP3: Identifizierung relevanter Radionuklide und wesentlicher Minerale im Kristallin anhand typischer Kristallinproben

Erstellung einer entsprechenden Parameter-Matrix zu Sorptionsreaktionen, Aufbau einer geeigneten thermodynamischen Datenbasis

AP7: Abschluss Kooperationsvertrag und Vertrag mit Unterauftragnehmer, Kickoff-Meeting mit TUC und UJV, Start PostDoc am 1.2. und Promovendin am 1.6.2023.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP2: Erweiterung des smart-Kd Workflows: Detailliertere Strukturierung und Abstraktion seiner Module, Ableitung von Sensitivitäts- und Unsicherheitsanalysen.

AP3: Erweiterung der Parametrisierung auf Ionenaustauschreaktionen, Überprüfung von Löslichkeitskonstanten für Feldspäte und Glimmer

Schließen kritischer thermodynamischer Datenlücken anhand von Literaturwerten

5. Berichte, Veröffentlichungen

keine

Zuwendungsempfänger: Institut für Endlagerforschung, Technische Universität Clausthal, Adolph-Roemer-Str. 2a, 38678 Clausthal-Zellerfeld		Förderkennzeichen: 02 E 12112B
Vorhabensbezeichnung: Systematic sensitivity analysis for mechanistic geochemical models using field data from crystalline rock (Teilprojekt B im Verbundvorhaben SANGUR)		
Zuordnung zum FuE-Programm: FuE-Bereich C3 Sicherheitsnachweis; FuE-Feld C3.1 Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-)Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung, FuE-Feld C3.3 Werkzeuge der Sicherheitsanalysen		
Laufzeit des Vorhabens: 01.02.2023 bis 31.01.2026	Berichtszeitraum: 01.02.2023 bis 30.06.2023	
Gesamtkosten des Vorhabens: 426.876,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Klaus-Jürgen Röhlig	

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Das Verbundprojekt SANGUR (Partner: Helmholtz-Zentrum Dresden - Rossendorf e.V., Institut für Ressourceökologie (HZDR), und ÚJV Řež, a. s. als Unterauftragnehmer des HZDR) zielt auf ein verbessertes Verständnis und die Einbeziehung von Parameterunsicherheiten im Kontext der nuklearen Entsorgung. Es ebnet den Weg, um denkbare und vertretbare Fehlermargen für alle wichtigen Zielfunktionen innerhalb von Langzeitsicherheitsbewertungen zukünftiger Endlagersysteme in tiefen geologischen Formationen, hier kristallinen Gesteinen, zu gewinnen. Das Projekt baut auf einem umfassenden State-of-the-Art-Bericht (SOTA) über die derzeitige Behandlung von Ungewissheiten durch Sensitivitätsanalysen in geologischen Systemen aus mathematischer Sicht auf, der auch fortgeschrittene Softwareimplementierungen umfasst. Ergänzt wird dies durch eine gründliche Analyse der reaktiven Transportprozesse in kristallinem Gestein und die Ableitung entsprechender Modelle. In einem nächsten Schritt werden diese Modelle unter Einbeziehung realistischer Unsicherheiten parametrisiert. Parallel dazu wird der SOTA-Bericht genutzt, um eine Toolbox zu entwickeln, welche ausgewählte Algorithmen zur Sensitivitätsanalyse (SA) mit repräsentativen geochemischen Speziationscodes kombiniert. Die Ergebnisse all dieser Projektebenen werden dann anhand eines Testfalls bewertet. Schließlich werden eine Methodik zur Modellreduzierung sowie Prioritäten für die künftige Forschung abgeleitet.

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

- AP 1: State-of-the-Art Bericht zur Sensitivitätsanalyse
- AP 2: Ableitung des reaktiven Transportmodells (ohne direkte Beteiligung TUC)
- AP 3: Modellparametrisierung und Unsicherheiten (ohne direkte Beteiligung TUC)
- AP 4: Prototyping einer Toolbox
- AP 5: Anwendung der Sensitivitätsanalyse auf einen Testfall
- AP 6: Modellreduktion und zukünftige Prioritäten
- AP 7: Projektleitung

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP7: Abschluss Kooperationsvertrag, Kickoff-Meeting mit HZDR und UJV

Geplante Weiterarbeiten

AP1: Literatursichtung zum State-of-the-Art-Bericht

AP4: Einarbeitung in die vorhandenen Softwarepakete zur Sensitivitätsanalyse

4. Berichte, Veröffentlichungen

keine

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 12122A
Vorhabensbezeichnung: Stabilität von Mineralphasen des Eisens im Nahfeld eines Endlagers (STAMINA)		
Zuordnung zum FuE-Programm: FuE-Bereich 3 „Sicherheitsnachweis“, insbesondere das FuE-Feld C3.1 „Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-)Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung“		
Laufzeit des Vorhabens: 01.04.2023 bis 31.03.2026	Berichtszeitraum: 01.04.2023 bis 30.06.2023	
Gesamtkosten des Vorhabens: 522.440,00 EUR	Projektleiter: Dr. Helge C. Moog	

1. Vorhabenziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Das Teilprojekt flankiert die im Manteldokument aufgeführten Ziele des Gesamtvorhabens. Im Detail soll anhand von Erkenntnissen aus früheren Vorhaben, weiteren Messdaten aus der Literatur sowie weiteren Versuchen ein Pitzer-Modell für zweiwertiges Eisen unter expliziter Berücksichtigung von komplexen Spezies erstellt werden. Die Löslichkeit relevanter Fe(II)-Festphasen soll unter salinaren, endlagerrelevanten Bedingungen ermittelt werden. Die mögliche Relevanz weiterer Fe(II)- und Fe(III)-Festphasen soll in einer Studie untersucht werden. Gemeinsam mit dem Verbundpartner wird die finale Auswahl an thermodynamischen Daten (Pitzer-Koeffizienten, Komplexbildungskonstanten, Löslichkeitskonstanten) dokumentiert und publiziert. Den Anwendern dieser neu entwickelten Datenbasis sollen in einem Handbuch Leitlinien aufgezeigt werden, unter welchen Bedingungen bestimmte Mineralphasen in Modellrechnungen unterdrückt werden sollten, da sich aller Erfahrung nach metastabile Zustände einstellen werden.

Dieses Vorhaben nimmt Bezug auf die folgenden laufenden und abgeschlossenen FuE-Vorhaben:

Vorhaben	Förderkennzeichen/Förderung durch	Laufzeit
KORPHA	02 E 11314	01.09.2014 – 30.11.2019
KORSO	02 E 11496	01.05.2016 – 30.04.2020
ThermAc3	02 NUK 039 A KIT-A.Nr.: 320/20599764	01.03.2015 – 30.04.2020
Fe-RN	SKB	01.10.2013 – 30.09.2016
ImKorb	02E 11981	laufend – 31.07.2024
ConCorD	WP15 zu EURAD (Grant Agreement 847593)	laufend – 31.05.2024
MaCoTe	Untertagelabor Grimsel	laufend
diverse	OECD-NEA	laufend

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

AP1: Speziation

AP2: Bestimmung der Löslichkeit relevanter Korrosionsphasen

AP3: Erstellung eines Pitzer-Modells für zweiwertiges Eisen

AP4: „Best-Practice“-Dokument zur geochemischen Modellierung von Eisenkorrosionsphasen in salinaren Lösungen (auf Englisch)

AP5: Dokumentation der Datenselektion

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1: für die System Fe(II)-Na-Cl-H₂O(I) und Fe(II)-K-Cl-H₂O(I) wurden isopiestiche Versuche bei den Temperaturen 40, 60 und 90 °C durchgeführt. Versuche für die Systeme Fe(II)-Mg-Cl-H₂O(I) und Fe(II)-Ca-Cl-H₂O(I) wurden vorbereitet.

AP2: Synthese von Korrosionsphasen und Beginn von Löslichkeitsversuchen für die folgenden Systeme: Fe(OH)₂-NaOH-H₂O(I), Fe(OH)₂-KOH-H₂O(I), (Fe,Mg)(OH)₃Cl-H₂O(I), (Fe,Mg)(OH)₂CO₃-H₂O(I)

AP4+5: Es wurden jeweils Gliederungen erstellt und soweit erforderlich Zuständigkeiten definiert.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP1: Fortführung der isopiestiche Versuche für die Systeme Fe(II)-K-Cl-H₂O(I) und Fe(II)-Mg-Cl-H₂O(I)

AP2: Fortführung der Löslichkeitsversuche

5. Berichte, Veröffentlichungen

Präsentation des Vorhabens beim Projektstatusgespräch am 06. und 07. November 2023 in Karlsruhe.

Auftragnehmer: Karlsruher Institut für Technologie (KIT) Institut für Nukleare Entsorgung (INE)		Förderkennzeichen: 02 E 12122B
Vorhabensbezeichnung: Stabilität von Mineralphasen des Eisens im Nahfeld eines Endlagers (STAMINA)		
Zuordnung zum FuE-Programm: FuE-Bereich 3 „Sicherheitsnachweis“, insbesondere das FuE-Feld C3.1 „Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-)Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung“		
Laufzeit des Vorhabens: 01.04.2023 bis 31.03.2026	Berichtszeitraum: 01.04.2023 bis 30.06.2023	
Gesamtkosten des Vorhabens: 239.471,61 EUR	Projektleiter: Dr. Marcus Altmaier	

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Das Teilprojekt realisiert die im Manteldokument aufgeführten Ziele des Gesamtvorhabens durch KIT-INE. Im Detail soll anhand von Erkenntnissen aus früheren Vorhaben, weiteren Messdaten aus der Literatur sowie neuen experimentellen Arbeiten in STAMINA ein Pitzer-Modell für zweiwertiges Eisen unter expliziter Berücksichtigung von komplexen Spezies erstellt werden. Die Löslichkeit relevanter Fe(II)-Festphasen soll unter salinaren, endlagerrelevanten Bedingungen ermittelt werden. Die mögliche Relevanz weiterer Fe(II)- und Fe(III)-Festphasen soll in einer Studie untersucht werden. Gemeinsam mit dem Verbundpartner wird die finale Auswahl an thermodynamischen Daten (Pitzer-Koeffizienten, Komplexbildungskonstanten, Löslichkeitskonstanten) dokumentiert und publiziert. Potentielle Anwender dieser neu entwickelten Datenbasis sollen in einem Handbuch Leitlinien zur Benutzung erhalten.

Dieses Vorhaben nimmt Bezug auf die folgenden laufenden und abgeschlossenen Projekte bzw. FuE-Vorhaben: KORPHA, KORSO, ThermAc3, Fe-RN, ImKorb, ConCorD, MaCoTe, NEA-TDB.

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

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

AP 1: Speziation.

AP 2: Löslichkeitsmessungen relevanter Eisen-Festphasen unter salinaren Bedingungen.

AP 3: Erstellung eines Pitzer Modells bzw. entsprechender SIT Modelle.

AP 4: „Best-Practice“-Dokument zur geochemischen Modellierung von Eisenkorrosionsphasen in salinaren Lösungen.

AP 5: Dokumentation der Datenselektion.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP 1: keine Aktivitäten. Der Start des AP ist am KIT-INE für 2024 geplant.

AP 2: (i) Umfassende Literaturrecherche zu den beiden Fe(II)- und Fe(III)-Systemen hinsichtlich Löslichkeit, Hydrolyse und Carbonatkomplexierung; (ii) Vorläufige Löslichkeits- und Speziationsrechnungen für die betrachteten Systeme unter Verwendung verfügbarer thermodynamischer Daten (Schwerpunkt NEA-TDB und ThermoChimie); (iii) Bewertung verschiedener Synthesewege für die Herstellung von wasserhaltigen Fe(II)- und Fe(III)-Oxo-Hydroxidfestphasen.

AP 3: keine Aktivitäten. Der Start des AP ist am KIT-INE für 2024 geplant.

AP 4+5: Es wurden jeweils Gliederungen erstellt und erforderliche Zuständigkeiten definiert.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP 1: keine Aktivitäten im 2ten Halbjahr 2023. Start des AP am KIT-INE ist für 2024 geplant.

AP 2: (i) Synthese von $\text{Fe}(\text{OH})_2(\text{cr})$ und 2/6-Linien-Ferrihydrit (oder alternativen Fe(III)-Oxo-Hydroxid-Festphasen); (ii) Experimentelle Charakterisierung der synthetisierten Festphasen mit Hilfe eines Multimethodenansatzes; (iii) Definition der experimentellen Randbedingungen für die Löslichkeitsexperimente mit Fe(II) in KCl-KOH, NaCl-NaOH und $\text{CaCl}_2\text{-Ca}(\text{OH})_2$ Systemen; (iv) Initiierung der Löslichkeitsexperimente mit Fe(II) in Abwesenheit von Carbonat; (v) Festlegung der experimentellen Randbedingungen für die Löslichkeitsexperimente mit Fe(III) aus der Untersättigung in Abwesenheit und Anwesenheit von Carbonat.

AP 3: keine Aktivitäten im 2ten Halbjahr 2023. Start des AP am KIT ist für 2024 geplant.

AP 4+5: keine Aktivitäten in 2ten Halbjahr 2023.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Es wurden keine Berichte oder Veröffentlichungen im Berichtszeitraum erstellt.

Auftragnehmer: Friedrich-Schiller-Universität Jena (FSU)		Förderkennzeichen: 02 E 12153A	
Vorhabensbezeichnung: Erosion von Bentonit unter In-situ Bedingungen durch Einwirkung natürlicher Wässer in geologischen Tiefenlagern. Kurztitel: EVIDENT			
Zuordnung zum FuE-Programm: C1.1 Geowissenschaftliche und geotechnische Methoden zur Standorterkundung (Feld und Labor), C1.2 Charakterisierung des Geosystems und Geosynthese, C1.3 Thermisch, hydraulische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb) Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung, C2.3 Geotechnische und technische Barrieren und C3.3 Werkzeuge der Sicherheitsanalyse			
Laufzeit des Vorhabens: 01.06.2023 bis 30.05.2026		Berichtszeitraum: 01.06.2023 bis 30.06.2023	
Gesamtkosten des Vorhabens: 395.520,00 EUR		Projektleiter: Prof. Dr. Schäfer	

1. Vorhabenziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Das übergeordnete Ziel des Vorhabens ist es, das mechanistische Verständnis der für die Integrität der geotechnischen Barriere kritischen Prozesse unter naturnahen, endlagerrelevanten Bedingungen in geklüfteten Granitsystemen zu erhöhen und eine belastbare prognostizierende Modellierung der Bentonitbuffers und des kolloidgetragenen Radionuklidtransport zur Verfügung zu stellen.

Die Arbeiten sind in das CFM-Projekt am Grimsel Felslabor eingebettet und bauen zum Teil auf den in Kolorado-e³ (FKZ: 02 E 11759A) erzielten Erkenntnissen auf, betrachten aber auch gänzlich neue Aspekte.

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

AP1: Experimentelle Arbeiten
 AP2: Modellrechnungen
 AP3: Projektkoordination und Qualitätsmanagement

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Das Vorhaben begann offiziell am 01.06.2023, die Vertragsunterzeichnung ist noch in Bearbeitung. Daher fanden im Berichtszeitraum keine Arbeiten statt.

4. Geplante Weiterarbeiten

Keine

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine

Auftragnehmer: Karlsruher Institut für Technologie (KIT)	Förderkennzeichen: 02 E 12153B
Vorhabensbezeichnung: Erosion von Bentonit unter In-situ Bedingungen durch Einwirkung natürlicher Wässer in geologischen Tiefenlagern. Kurztitel: EVIDENT	
Zuordnung zum FuE-Programm: C1.1 Geowissenschaftliche und geotechnische Methoden zur Standorterkundung (Feld und Labor), C1.2 Charakterisierung des Geosystems und Geosynthese, C1.3 Thermisch, hydraulische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb) Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung, C2.3 Geotechnische und technische Barrieren und C3.3 Werkzeuge der Sicherheitsanalyse	
Laufzeit des Vorhabens: 01.06.2023 bis 30.05.2026	Berichtszeitraum: 01.06.2023 bis 30.06.2023
Gesamtkosten des Vorhabens: 388.297,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Geckeis

1. Vorhabenziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Das übergeordnete Ziel des Vorhabens ist es, das mechanistische Verständnis der für die Integrität der geotechnischen Barriere kritischen Prozesse unter naturnahen, endlagerrelevanten Bedingungen in geklüfteten Granitsystemen zu erhöhen und eine belastbare prognostizierende Modellierung des Bentonitbuffers und des kolloidgetragenen Radionuklidtransport zur Verfügung zu stellen.

Die Arbeiten sind in das CFM-Projekt am Grimsel Felslabor eingebettet und bauen zum Teil auf den in Kolorado-e³ (FKZ: 02 E 11759A) erzielten Erkenntnissen auf, betrachten aber auch gänzlich neue Aspekte.

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

AP1: Experimentelle Arbeiten

AP2: Modellrechnungen

AP3: Projektkoordination und Qualitätsmanagement

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Das Vorhaben begann offiziell am 01.06.2023, die Vertragsunterzeichnung ist noch in Bearbeitung. Daher fanden im Berichtszeitraum keine Arbeiten statt.

4. Geplante Weiterarbeiten

Keine

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 12153C
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Erosion von Bentonit unter In-situ Bedingungen durch Einwirkung natürlicher Wässer in geologischen Tiefenlagern (EVIDENT), Teilprojekt C		
Zuordnung zum FuE-Programm: C1.1 Geowissenschaftliche und geotechnische Methoden zur Standorterkundung (Feld und Labor), C1.2 Charakterisierung des Geosystems und Geosynthese, C1.3 Thermisch, hydraulische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb) Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung, C2.3 Geotechnische und technische Barrieren und C3.3 Werkzeuge der Sicherheitsanalyse		
Laufzeit des Vorhabens: 01.06.2023 bis 30.05.2026	Berichtszeitraum: 01.06.2023 bis 30.06.2023	
Gesamtkosten des Vorhabens: 291.110,00 EUR	Projektleiter: Dr. Holger Seher	

1. Vorhabenziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Das übergeordnete Ziel des Vorhabens ist es, das mechanistische Verständnis der für die Integrität der geotechnischen Barriere kritischen Prozesse unter naturnahen, endlagerrelevanten Bedingungen in geklüfteten Granitsystemen zu erhöhen und eine belastbare prognostizierende Modellierung der Bentonitbuffers und des kolloidgetragenen Radionuklidtransport zur Verfügung zu stellen.

Die Arbeiten sind in das CFM-Projekt am Grimsel Felslabor eingebettet und bauen zum Teil auf den in Kolorado-e³ (FKZ: 02 E 11759C) erzielten Erkenntnissen auf, betrachten aber auch gänzlich neue Aspekte.

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

AP1: Experimentelle Arbeiten

AP2: Modellrechnungen

AP3: Projektkoordination und Qualitätsmanagement

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Das Vorhaben begann offiziell am 01.06.2023, die Vertragsunterzeichnung ist noch in Bearbeitung. Daher fanden im Berichtszeitraum keine Arbeiten statt.

4. Geplante Weiterarbeiten

Keine

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine

2.2 Vorhaben Bereich D1 – D3

Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer: Technische Universität Clausthal, Adolph-Roemer-Straße 2a, 38678 Clausthal-Zellerfeld		Förderkennzeichen: 02 E 11849A
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt A		
Zuordnung zum FuE-Programm: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2019 bis 30.09.2024	Berichtszeitraum: 01.01.2023 bis 30.06.2023	
Gesamtkosten des Vorhabens: 3.003.244,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Klaus-Jürgen Röhlig	

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

In TRANSENS soll transdisziplinär geforscht werden: Die interessierte Öffentlichkeit und andere außerakademische Akteure werden planvoll in Forschungskontexte eingebunden. Die Möglichkeiten transdisziplinärer Forschung in der nuklearen Entsorgung werden systematisch reflektiert.

Im TAP SAFE wird transdisziplinär untersucht, ob und inwieweit Sichtweisen von Nicht-Spezialisten nahelegen, das Konzept des Safety Case (SC) anzupassen oder weiterzuentwickeln, um so die Diskurs- und Beratungsfähigkeit zu verbessern. Das Institut für Endlagerforschung, Fachgebiet für Endlagersysteme (ELS) koordiniert das TAP und bearbeitet die Module „Analyse“, „Synthese und Konzept“, „Transdisziplinäre Kommunikation und Auswertung“, „Ergebnisdarstellung von Modellrechnungen“ sowie „Berichterstattung und Empfehlungen“. Der Lehrstuhl für Geomechanik und multiphysikalische Systeme (GEMS) bearbeitet die Module „Transdisziplinäre Kommunikation und Auswertung“ und „Analyse des langzeitigen Systemverhaltens von Tiefenlagern“. Der Arbeitsschwerpunkt der risicare GmbH (im Unterauftrag) ist das Thema „Ungewissheiten“. In einem Verfahren, das die Rückholung eingelagerter Abfälle im Falle einer ungünstigen Entwicklung des Lagers vorsieht, muss man sich frühzeitig Gedanken machen über Monitoring-Strategien, Entscheidungswege, Entscheidungsträger und Verantwortlichkeiten. Dies ist Gegenstand des TAP TRUST, in dem GEMS zu Fragen des Monitorings forscht.

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

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

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

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

Modul SAFE 3: Transdisziplinäre Kommunikation und Auswertung

Modul SAFE 4: Ergebnisdarstellung von Modellrechnungen, Indikatoren, Ungewissheiten

Modul SAFE 5: Analyse des langzeitigen Systemverhaltens von Tiefenlagern

Modul SAFE 7: Lösungsorientierte Berichterstattung und Empfehlungen

Modul TRUST 4: Analyse des Tiefen-/Endlagerverhaltens im Monitoringzeitraum anhand von numerischen

TH2M-gekoppelten Simulationen: Literaturanalyse; Interaktiver Aufbau einer Gesprächsbasis mit der AGBe; Exemplarische Analyse des offenen / versetzten Tiefen-/Endlagerverhaltens im Monitoringzeitraum anhand von

numerischen TH2M-gekoppelten Simulationen; Diskursiver Dialog mit der AGBe zur Identifizierung von Anforderungen an die Ausgestaltung von als vertrauenswürdig angesehenen Monitoringprogrammen; Rückspiegelung an außerwissenschaftliche Akteure / AGBe; Aufbau einer Plattform zur Visualisierung und Illustration von Simulationsergebnissen

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

ELS (Koordination und Kommunikation): Das Projekttreffen wurde vom 01.-03.03. in Darmstadt mit dem ÖI organisiert und durchgeführt. Von Vorträgen bis zum Wissensmarktplatz, wurden aktuelle Forschungsthemen besprochen. Am Vortag wurde ein Teamleiter:innentreffen abgehalten. Weiterhin gab es Treffen von I-TD und Beirat TD. Der Prozess der Selbstevaluation wurde begleitet und mit Veröffentlichung als TRANSENS-Bericht abgeschlossen. Insgesamt wurden drei Berichte zur Veröffentlichung begleitet. Die Organisation der TRANSENS-Abschlussveranstaltung wurde koordiniert und Datum (13./14.09.24) und Veranstaltungsort (Leibnizhaus Hannover) konkretisiert. Sieben interne und drei externe Newsletter wurden im neuen Design versendet. Ein Anstieg der Abonnenten sowie eine erhöhte Resonanz auf den Newsletter waren zu verzeichnen. Die Artefaktdatenbank wurde um weitere Funktionen ergänzt. Aufgaben wie das Betreuen der TRANSENS-Hotline, das Pflegen der Homepage und die Koordinationsprechstunde wurden kontinuierlich fortgeführt.

ELS & GEMS: Gemeinsame Arbeiten im TAP SAFE: Das Thema „Indikatoren“ wurde als modulübergreifendes Thema aufgegriffen und tiefer behandelt als in der Vorhabenbeschreibung angestrebt. Damit wurde auf Ergebnisse der Selbstevaluation und Wünsche der AGBe eingegangen. Im Rahmen des Projekttreffens wurde ein „Wissensmarktstand“ mit Postern und Umfrage angeboten. Die erhobenen Daten wurden für einen internen Bericht aufbereitet. Dieser sowie bislang erarbeitete Simulationsergebnisse flossen in die Konzeption eines zusätzlichen AGBe-Workshops zu „Indikatoren“ ein (02.-03.06. online, gemeinsam mit IRS). Der Workshop setzte mit Blick auf Teilziel 3 (Modul 5) Schwerpunkte in den Bereichen Visualisierung und Wahrnehmung. Aufgrund der praktischen Schwierigkeiten, die einer Umsetzung von AGBe-Workshops unter Einbezug des Softwarepakets „ReSUS“ entgegenstehen, wurden im Vorfeld erzeugte Ergebnisdarstellungen als Diskussionsgrundlage genutzt. Der Meilenstein SAFE M14 wurde erreicht.

ELS (TAP SAFE, EDU): Mit UK-A&O wurde ein Treffen des TAP SAFE durchgeführt, in dem u.a. Lessons Learned aus der SAFE-Selbstevaluation, gegenwärtige Arbeitsstände sowie geplante Arbeiten thematisiert wurden. Zwei Beiträge zum Sammelband Ungewissheit wurden fertiggestellt. Es wurden zwei Beiträge zur TRANSENS-Ringvorlesung geleistet und bei Konzeption und Vorbereitung der TRANSENS-Sommerschule mitgearbeitet. Eine Abschlussarbeit (M.Sc.) wurde fertiggestellt.

GEMS: Die Entwicklung von multiphysikalischen Simulationen im Tongestein sowie Arbeiten an der Ergebnisdokumentation wurden fortgeführt. Es wurden zwei Beiträge zur TRANSENS-Ringvorlesung geleistet sowie an einer Ringvorlesung an der TU Braunschweig zur Nachhaltigkeit von Endlageroptionen mitgewirkt. TAP SAFE spezifisch wurden die numerischen Simulationen am reduzierten Lokalmodell im Tonstein durchgeführt. Simulationsergebnisse stehen als Input für TD-Formate in Modul 3 zur Verfügung (SAFE M17 / M18). TAP TRUST spezifisch wurde ein weiterer td-Workshop mit der AGBe zum Thema Monitoring durchgeführt (TRUST M16). Dort sind etwa die webbasierte interaktive Visualisierung von Simulationsergebnissen sowie die Simulation des Endlagersystemverhaltens im Monitoringzeitraum mittels gekoppelter THM-Simulationen eingeflossen.

risicare: Zum Sammelband Ungewissheiten wurde ein eigener Beitrag fertiggestellt, ebenso wie das abschließende Synthesekapitel, letzte Reviews und die Organisation zum Einreichen des Manuskripts beim Verlag. Zum Thema „td-Reviews“ wurde ein Entwurf eines TRANSENS-Berichts erstellt. Zur Selbstevaluation fanden redaktionelle Arbeiten an den

TRANSENS-Berichten statt. Daneben hat risicare etwa an Aktivitäten zum „Abschied von 2031“ mitgearbeitet. Anne Eckhardt hat sich im Sprecherteam von TRANSENS engagiert.

4. Geplante Weiterarbeiten

ELS (Koordination und Kommunikation): Die geplanten Veranstaltungen werden organisiert und die Durchführung begleitet. Die Jours Fixes mit dem Beirat TD werden fortgeführt. Die Präsentation des Gesamtprojektes im Rahmen des „innovercity“-Programms in Hannover wird angestrebt und begleitet.

ELS (TAP SAFE, EDU): Die Selbstevaluation des TAP SAFE wird als TRANSENS-Bericht veröffentlicht. Eine Veröffentlichung zur Durchführung von Workshops mit den Formaten Graduiertenakademie, Fokusgruppe und AGBe ist in Vorbereitung. Der AGBe-Workshop vom 02./03.06. wird ausgewertet. Der Fokus in Modul 4 wird von „ReSUS“ zu allgemeingültigeren Konzepten verlagert. Ein Workshop im Rahmen des safeND (13.-15.09., Berlin) wird durchgeführt. Ein Formatvorschlag wurde beim Forum Endlagersuche (17./18.11., Halle) eingereicht.

GEMS: Zukünftig sollen numerische Simulationen im Tongestein mit dem 1- und 2-Sohlen-Lokalmodell durchgeführt werden (SAFE Modul 5 TZ-2). Die Auswertung und Dokumentation beider transdisziplinärer Workshops aus TAP TRUST und TAP SAFE wird durchgeführt. Darüber hinaus wird an der Ergebnisdokumentation im Hinblick auf den Abschlussbericht gearbeitet (TRUST M18 / SAFE M19).

Risicare: Das Thema „td-Reviews“ soll mit einem Beitrag bei der Konferenz safeND und der Veröffentlichung eines TRANSENS-Berichts abgeschlossen werden. Das zentrale td-Experiment im TAP SAFE wird unterstützt, unter anderem bei einem Format im Rahmen des Forums Endlagersuche.

5. Berichte, Veröffentlichungen

TRANSENS (2023): Drei Jahre transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle – Selbstevaluation des Vorhabens TRANSENS. TRANSENS Bericht 09.(2022), Vortrag: Investigation of the impact of an additional monitoring level above the disposal level in a radioactive waste repository in rock salt. 10th Conference on the Mechanical Behavior of Salt (SaltMechX) 07.07.2022; Röhlig, K.-J. (2022), Vortrag: Input from outside the Safety Case community: Improving Safety Case content and communication using electronic tools. NEA IDKM/EGSSC Workshop on Digital Safety Case Methods and Development. Berlin, 25.-26.10.2022, Röhlig, K.-J./ Ebeling, M./ Eckhardt, A./ Hocke, P./ Krütli, P. (2022), Vortrag: Transdisciplinary research on nuclear waste management – can it work? A case study on repository safety. 3rd DAEF Symposium: Key Topics on Deep Geological Disposal – Challenges of a Site Selection Process: Society – Procedures – Safety. Köln, 05.-07.07.2022

Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer: Christian-Albrechts-Universität zu Kiel, Philosophisches Seminar		Förderkennzeichen: 02 E 11849B
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt B		
Zuordnung zum FuE-Programm: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 5: Wissensmanagement und sozio-technische Fragestellungen, Feld 5.2		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2019 bis 30.09.2024	Berichtszeitraum: 01.01.2023 bis 30.06.2023	
Gesamtkosten des Vorhabens: 1.375.945,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Konrad Ott	

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

In TRANSENS soll transdisziplinär geforscht werden: Die interessierte Öffentlichkeit und andere außerakademische Akteure werden planvoll in Forschungskontexte, konkret in Transdisziplinäre Arbeitspakete (TAP) eingebunden.

Die Möglichkeiten transdisziplinärer Forschung in der nuklearen Entsorgung werden im Verbund systematisch reflektiert (Transdisziplinaritätsforschung). Spezielle Aktivitäten zielen auf Nachwuchsförderung und Kompetenzerhalt.

Die Arbeitsgruppe an der CAU ist Projektpartner im TAP DIPRO.

Dialog und Diskurs sind Schlüssel zur Verständigung. Wie muss der langwierige Prozess gestaltet werden, um dafür gute Bedingungen auf dem Entsorgungspfad zu schaffen? Das ist Gegenstand der transdisziplinären Forschung im TAP DIPRO.

Am Philosophischen Seminar und am Institut für Informatik werden in interdisziplinärer Kooperation (i) Narrative des Entsorgungsdiskurses analysiert, (ii) eine Theorie von "wicked communication" entwickelt, (iii) gesellschaftliche Steuerungsmedien bewertet, (iv) Nachvollziehbarkeit und Transparenz des Entsorgungsprozesses wissenschaftstheoretisch untersucht und über Visualisierungen für den transdisziplinären Forschungsmodus aufbereitet, unterstützend wird hierzu (v) eine Multimediawerkstatt aufgebaut.

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

Das Arbeitsprogramm in DIPRO zeichnet sich durch eine disziplinäre Aufbereitung von Sachverhalten, die interdisziplinäre Verständigung darüber und im Kern der Forschungsarbeit durch Workshops aus, bei denen verschiedene transdisziplinäre Formate entsprechend der Themensetzung zur Anwendung kommen werden. Im ersten Projektjahr soll zudem eine eigens für DIPRO gebildete Begleitgruppe aus wenigen Laien eingesetzt werden, die die Gestaltung und die Inhalte der Workshops über die Projektlaufzeit hin reflektiert. Die zentralen Forschungsfragen, die DIPRO an die Begleitgruppe und die Workshops stellt, sind:

1. Welche normativen Voraussetzungen, praktischen Anforderungen und gesellschaftlichen Erwartungen gilt es, für ein gerechtes und resilientes Verfahren und den jeweiligen Entsorgungspfad zu berücksichtigen? 2. Welche gesellschaftlichen Erwartungen und Ansprüche an eine zielführende Endlager-Governance und Öffentlichkeitsbeteiligung lassen sich identifizieren und wie können diese in politische Maßnahmen einfließen?

3. Wie ist das Standortauswahlverfahren unter Bedingungen von „wicked problems“ und „wicked communication“ im Sinne von „good governance“ auszugestalten?

Neben anwendungsorientierter Grundlagenforschung (desk-research, Experimente) bestehen die wesentlichen Arbeitspunkte des Kieler Teilprojektes in der Entwicklung, Durchführung und Evaluation transdisziplinärer Formate (Workshops, Multimediawerkstatt, Informationsdesigns). Inhaltliche Schwerpunkte liegen auf Verfahrensgerechtigkeit, Kommunikation und Standortverantwortung.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- Weiterentwicklung Kommunikationsstrukturen innerhalb DIPROs
- Fortsetzung Aufarbeitung des Forschungsstandes inter- und transdisziplinärer Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle.
- Kontinuierliche Arbeit mit der DIPRO-Begleitgruppe (DBG): monatliche Teeküche; inhaltliche Ausgestaltung einer Session auf dem TRANSENS-Projekttreffen in Darmstadt (weitestgehend in Eigenregie von DBG und AGBe)
- Beteiligung an Vorbereitung und Durchführung einer DIPRO-Klausur (online, 16.02.2023) zum aktuellen Stand der Forschungsarbeiten
- Verfassen von Beiträgen für einen DIPRO-Bericht zum Stand der Forschungsarbeiten
- Verfassen eines Beitrages für die „Mensch und Computer“-Konferenz
- Verfassen eines Beitrages für das Informatik 2023 Festival
- Verfassen eines Beitrags für den Sammelband/Arbeitsbericht der TRANSENS-Bearbeiter*innen.
- Verfassen zweier Beiträge für den Sammelband „Energieverantwortung. Beiträge zu ethischen Grundlagen und Zuständigkeiten in inter- und transdisziplinärer Perspektive“ in der Springer-Reihe *Ethics of Science and Technology Assessment*
- Entwicklung einer VR-Anwendung zur Visualisierung von endlagerrelevanten Zeiträumen
- Betreuung eines Stands auf dem ‚Wissensmarktplatz‘ sowie Vorträge beim TRANSENS-Projekttreffen in Darmstadt (01.03.-03.03.2023)
- Durchführung des Workshops E-2 in Greifswald (31.03.-01.04.2023)
- Vorbereitung des Workshops E-3 mit TAP HAFF (monatlich)
- Teilnahme an regelmäßigen TD-Treffen mit anderen TAPs.
- Vortrag auf der TRANSENS-Ringvorlesung (Juni 2023)
- Vortrag auf der JFAI Konferenz 2023 zu Inter- und Transdisziplinarität (online 26.04.2023)
- Vortrag auf dem Autorenworkshop des Sammelbands zur Standortvereinbarung (Karlsruhe 29.06.2023)
- Vorstellung von Projektergebnissen:
 - Vorträge von Christian Loos mit TRANSENS-Bezug:
 - 17.01.2023
 - *Philosophische und ethische Reflexionen zur Entsorgung* (Vortrag im Rahmen der TRANSENS Ringvorlesung- Ort: Institute of Radioecology and Radiation Protection - Leibniz Universität Hannover)
 - 11.05.2023
 - *Die Endlagersuche und Zwischenlagersituation aus philosophisch-ethischer Perspektive. Zur Entsorgungsfrage mittel und hoch radioaktiver Reststoffe* (öffentlicher Abendvortrag am Forschungsinstitut für Philosophie Hannover)
 - 18.05.2023
 - *Die Energiewende aus philosophisch-ethischer Perspektive: Philosophische Politikberatung als Gesellschaftsberatung* (Vortrag im Rahmen der Fachschaftstagung Biologie/Chemie *Power2us – Herausforderungen und Perspektiven für die Energiewende in Deutschland* des Cusanuswerks vom 17.05.-21.05.2023, Ort: Wilhelm-Kliewer-Haus, Mönchengladbach)

4. Geplante Weiterarbeiten

- Mitorganisation eines Workshops auf der safeND-Tagung in Berlin (13.-15.09.2023); Vortrag zu Ergebnissen der Workshops E-2 und E-3 im Rahmen des safeND-Workshops.
- Durchführung von Workshop E-3 in Neckarwestheim
- Beteiligung an der Planung und Durchführung von Workshop F in Hannover (03.-04.11.2023)
- Betreuung eines Stands bei der Veranstaltung Innovercity in Hannover (01.-02.12.2023)
- Weiterentwicklung der VR Anwendung
- Verfassung von zwei Beiträgen für den Sammelband zur Standortvereinbarung.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Sierra, R. (2023): Classifications of knowledge: actors, disciplines and global traditions (Abstract). *Salud, Ciencia y Tecnología – Serie de Conferencias*. 2023; 2(1):61.
<https://doi.org/10.56294/sctconf202361>

Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer: Freie Universität Berlin, FB Politik und Sozialwissenschaften		Förderkennzeichen: 02 E 11849C
Vorhabensbezeichnung: Verbundvorhaben: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland – TRANSENS, Teilprojekt C		
Zuordnung zum FuE-Programm: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle – Förderkonzept des BMWi (2015-2018), FuE-Bereich 5		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2019 bis 30.09.2024	Berichtszeitraum: 01.01.2023 bis 30.06.2023	
Gesamtkosten des Vorhabens: 991.894,00 EUR	Projektleiter: PD Dr. A. Brunnengräber	

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

In TRANSENS wird transdisziplinär geforscht: Die interessierte Öffentlichkeit und andere außerakademische Akteure werden gezielt in Forschungskontexte, konkret in Transdisziplinäre Arbeitspakete (TAP), eingebunden. Die Analyse der transdisziplinären Forschungsaktivitäten soll Hinweise liefern, wie die Kommunikation zwischen Wissenschaft und den Beteiligten des Standortauswahlverfahrens sowie der Bevölkerung verbessert werden kann. Spezifische Aktivitäten zielen auf Aus- und Weiterbildung sowie auf die Nachwuchsförderung und den Kompetenzerhalt.

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

Die FU Berlin ist zentral am TAP DIPRO beteiligt: Dialoge und Prozessgestaltung in Wechselwirkung von Recht, Gerechtigkeit und Governance. Untersucht werden in interdisziplinärer Kooperation und mittels transdisziplinärer Formate: (1) Narrative und Frames der Entsorgungsdiskurse / „wicked communication“, (2) Charakteristika von „wicked problems“ aus dialogischer Perspektive, (3) Wissensbestände und vertrauensbildende Wissensaufbereitung und –vermittlung sowie (4) Formen und Medien der Regulierung. Die FU Berlin ist zudem in die Begleitforschung zu Transdisziplinarität eingebunden (BegleitTeam.TD). Hier erfolgt die formative und reflektierende Begleitung der TAP-Forschenden und der am Forschungsprozess beteiligten Öffentlichkeit wie der außerakademischen Akteure.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- Nachbereitung von 3 DIPRO-Workshops, die in 2/2022 in Berlin stattfanden
- 2 Vorträge beim Gesamttreffen von TRANSENS in Darmstadt, 1 bei der DVPW in Münster
- Veröffentlichungen: Fachzeitschrift (3), Sammelband (2), Zeitung (2), Arbeitsbericht (1)
- 1 Einreichung in GAIA, Fertigstellung des Beitrags „wicked financing“ für den Sammelband Ungewissheiten (nach internem Review)

DIPRO:

- Zusammenarbeit mit DIPRO-Begleitgruppe (DBG):
 - Gemeinsame Reflexion zum Workshop B „(Nicht) Mein Endlager“ am 22. Oktober im Museum für Naturkunde Berlin; Fortsetzung der Auswertung Workshop B mit DBG
 - 1x monatlich stattfindende informelle Treffen zum Austausch („Teeküche“)
- Vorbereitung des DIPRO-Workshops F (mit CAU, LUH, ITAS)
- Einreichung eines Beitrags „Auswertung von Workshop B im Museum“ bei GAIA (im Review)

- Teilnahme am transdisziplinären DIPRO-Workshop „Wie lange ist zwischen?“ in Greifswald (31. März / 1. April), am DIPRO-Austausch zum Abschied von 2031 (10.03.23), am DIW-Fachtreffen „Endlagersuche und Zukunft der Atomenergie“ (07.03.23)

BegleitTeam.TD:

- Auswertung der DIPRO-Workshops in 2/2022
- Gemeinsame Vorbereitung und Durchführung von TD-Beauftragten-Treffen (mit ETH Zürich)
- Vorbereitung einer Erhebung zur transdisziplinären Forschung innerhalb von TRANSENS

Bearbeiter*innen:

- Beitrag zum Sammelband: Reflektion zum transdisziplinären Forschen

4. Geplante Weiterarbeiten

- Intensivierung der Arbeit an den Dissertationen von Themann / Schwarz
- Weiterarbeit an Manuskripten – siehe oben „Arbeit an peer-reviewed Veröffentlichungen“

5. Berichte, Veröffentlichungen, Vorträge

VORTRÄGE:

- 16.02.23: **Denk, A.** „Workshop B – Museum für Naturkunde in Berlin“; DIPRO Onlinekonferenz
- 23.02.23: **Denk, A.** „Exklusive Öffentlichkeit“ im DVPW-Arbeitskreises, Münster
- 01/02.03.23 TRANSENS Projekttreffen Darmstadt: **Denk, A.** „Exklusive Öffentlichkeit – Prozesse der sozialen Schließung in der Bürgerbeteiligung zur Endlagerstandortfindung“; **Themann, D.** „(Nicht) Mein Endlager“ – Einblicke und Auswertung des Workshop B“

VERÖFFENTLICHUNGEN:

- Präger, F.; **Brunnengräber, Achim**; Von Hirschhausen, C. (2023): Atomwende? Ja, bitte! Warum die Abkehr von der Atomenergie und eine gute Entsorgungspolitik die Energiewende in Deutschland befördern werden. In: GAIA 32/1 (2023): 86 – 90
- **Schwarz L., Brunnengräber A.** (2023): Now its Getting Personal - Considering Nuclear Waste Justice from an Environmental and Individual Perspective. In: Schmidt M. et al [Hrsg.]: The Plurality of Political Ecology, augsburger.forschungswerkstatt. Universität Augsburg, S. 27-35.
- **Brunnengräber, A.; Schwarz, L.** (2023): Vielfalt an Betroffenheit: Politische, räumliche, soziale und zeitliche Skalenperspektiven auf die Endlagerung hochradioaktiver Abfälle. In: Zeitschrift für Politikwissenschaft (2023)
- **Schwarz L.,** Bräuer P., Consten W., Schöler M., Guth A., Nissen N., Gaebel B. (2023): Ein partizipatives WebGIS für die Endlagerstandortsuche - Eine transdisziplinäre Studie zu einer inklusiven Kommunikationsplattform. TRANSENS-Bericht-08. Berlin.
- **Brunnengräber, A.; Di Nucci, M. R.** (2023): The Long Road Towards the Soft Nuclear Repository State; **Di Nucci, M. R.**; Prontera, A. (2023), beides in: Arentsen, Maarten; Van Est, Rinie (2023): The Future of Radioactive Waste Governance, Wiesbaden: Springer VS.
- **Brunnengräber, A.** (2023): Japans Nuklear-Irrweg, in: Frankfurter Rundschau vom 23.04.2023, Kontaminierter Pazifik, Berliner Zeitung 05.06.2023
- **Brunnengräber, Achim; Denk, Albert; Schwarz, Lucas; Themann, Dörte** (2023): Monumentale Verdrängung. Die neue Pro-Atom-Troika. In: Blätter für deutsche und internationale Politik 2/23, 9-12
- Themann, D. (2022): Commoning in der Standortsuche für ein Endlager? Neue Wege kollektiven Handelns. TATuP 31/3: 51-57, <https://doi.org/10.14512/tatup.31.3.51>
- Brunnengräber, A. (2022): Die wahren Kosten der Atomenergie, Berliner Zeitung 30.09.2022
- Brunnengräber, A.; Denk, A.; Schwarz, L. (2022): Abschalten – jetzt erst recht!, Gastbeitrag auf Spiegel online (Politik), 07.08.2022,

Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer: Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Hermann-von-Helmholtz-Platz 1, 76344 Eggenstein-Leopoldshafen		Förderkennzeichen: 02 E 11849D
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt D		
Zuordnung zum FuE-Programm: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 5: Wissensmanagement und sozio-technische Fragestellungen, Feld 5.2		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2019 bis 30.09.2024	Berichtszeitraum: 01.01.2023 bis 30.06.2023	
Gesamtkosten des Vorhabens: 550.967,50 EUR	Projektleiter: Volker Metz, Ph.D.	

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

In TRANSENS soll transdisziplinär zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland geforscht werden. Die interessierte Öffentlichkeit und andere außerakademische Akteure werden planvoll in Forschungskontexte, konkret in Transdisziplinäre Arbeitspakete (TAP) eingebunden. Die Möglichkeiten transdisziplinärer Forschung in der nuklearen Entsorgung werden im Verbund systematisch reflektiert (Transdisziplinaritätsforschung). Spezielle Aktivitäten zielen auf Nachwuchsförderung und Kompetenzerhalt.

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

Die Schwerpunkte der Arbeiten des KIT-INE liegen im Modul „Pfadabhängigkeit als Risiko und Herausforderung“ des TAP „Handlungsfähigkeit und Flexibilität in einem reversiblen Verfahren“ (HAFF).

Unsere Arbeiten gliedern sich in das

AP1: „Sicherung von Handlungsfähigkeit im Standortauswahlverfahren und der Betriebsphase“

und das

AP2: „Technische und verfahrenstechnische Komponenten von Entsorgungspfaden und deren Nebenfolgen“.

In diesem Modul werden von uns Fragestellungen überprüft, die im Kontext des Standortauswahlverfahrens für Wärme entwickelnde Abfälle hinsichtlich Reflexivität und Reversibilität des Verfahrens von besonderer Bedeutung sind. Hierzu werden Arbeiten zur Zwischenlagerung und Entwicklung von Tiefenlagersystemen unter Berücksichtigung der technischen Barrieren und deren Implikationen durchgeführt, wobei insbesondere die Verknüpfung von Infrastruktur-, Strahlenschutz- und Betriebssicherheitsaspekten verschiedener Komponenten des Entsorgungspfads analysiert werden. Im weiteren Verlauf des Verbundvorhabens soll gemeinsam mit Partnern des TAP HAFF Haltepunkte definiert werden, an denen der jeweilige Sicherheitsstatus eines Entsorgungspfads überprüft und ein Dialog mit der Bevölkerung angestrebt wird.

Zusammenarbeit im Forschungsverbund TRANSENS: Das Arbeitspaket 2 „Technische und verfahrenstechnische Komponenten von Entsorgungspfaden und deren Nebenfolgen“ wird durch einen Mitarbeiter des KIT-INE geleitet.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im ersten Halbjahr 2023 lag der Arbeitsschwerpunkt von F. Becker auf der Erstellung des TRANSENS-Sammelbandes *„Entscheidungen für die Zukunft: Ungewissheiten bei der Entsorgung hochradioaktiver Abfälle“* als Autor von zwei eigenen Beiträgen und als Mitglied des Herausgeberteams. Dazu gehörte (a) die Fertigstellung des Gesamtkonzeptes einschließlich der Erstellung des Einleitungskapitels *„Die Vielfalt der Ungewissheit bei der Entsorgung hochradioaktiver Abfälle“* von R. Seidl, F. Becker, A. Eckhardt, V. Mintzloff, D. Scheer und des abschließenden Kapitels mit dem Titel *„Das Unbekannte vorausdenken?“* von A. Eckhardt, F. Becker, V. Mintzloff, D. Scheer, R. Seidl; (b) die Fertigstellung der beiden Beiträge *„Ungewissheiten und Narrative im Kontext der Entsorgung hochradioaktiver Abfälle – eine schwierige Beziehung?“* von F. Becker und M. Berg sowie *„Trittsicherheit auf Zukunftspfaden? Ungewissheitsbewältigung bei der Entsorgung hochradioaktiver Abfälle“* von D. Scheer, F. Becker, T. Hassel, P. Hocke, T. Leusmann, V. Metz; (c) die Begutachtung / Revision von Beiträgen anderer Autorinnen und Autoren des Sammelbands. Der Sammelband umfasst insgesamt 18 Beiträge und soll als Open-Access-Publikation erscheinen. Im Rahmen der TAP-übergreifenden Zusammenarbeit von F. Becker und V. Metz mit der Arbeitsgruppe der Technischen Universität Berlin / Wirtschafts- und Infrastrukturpolitik (TUB-WIP) und der Arbeitsgruppe des KIT-ITAS zu „techno-ökonomischen Aspekten“ der Entsorgung hochradioaktiver Abfälle wurde ein zweitägiges Treffen der drei Gruppen am KIT-INE und KIT-ITAS am 9. und 10. Februar 2023 durchgeführt. F. Becker und V. Metz organisierten dazu am 9. Februar 2023 eine gemeinsame Besichtigung kerntechnischer Einrichtungen des KIT am Campus Nord. Ein besonderer Schwerpunkt war dabei die Führung durch den Kontrollbereich des KIT-INE. Im TAP-HAFF werden die Pfadidentifikation und Folgenanalysen weiterentwickelt. Dazu wurde auf dem TRANSENS-Projekttreffen in Darmstadt vom 1. bis 3. März 2023 der gemeinsam mit T. Hassel (Leibniz Universität Hannover / Institut für Werkstoffkunde) untersuchte Teilpfad mit dem Thema *„Direkte Endlagerung von Transport- und Lagerbehältern mit hochaktiven Abfällen (Kernbrennstoff und Glas)“* in einem Vortrag vorgestellt. Die Vorbereitung und der Inhalt dieses Vortrags sind gleichzeitig als Grundlage für ein Manuskript zu diesem Thema gedacht. F. Becker nahm an den online Besprechungen des TAP-HAFF, des Herausgeberteams zum o.g. Sammelband, der TD-Interessierten (ETH Zürich), der TRANSENS-Bearbeiter*innen teilgenommen und der ad-hoc Gruppe „Zum Abschied von 2031“ teil. Am 26. Mai 2023 beteiligten sich F. Becker und V. Metz am Treffen zum Thema *„Austausch zu den TD-Erfahrungen in HAFF“* mit Pius Krütli (TD-Lab/ETH Zürich) am ITAS in Karlsruhe.

4. Geplante Weiterarbeiten

Das Herausgeberteam (bestehend aus A. Eckhardt, F. Becker, V. Mintzloff, D. Scheer und R. Seidl) des o.g. Sammelbands plant die Endversion im zweiten Halbjahr 2023 bei Springer Nature zu publizieren. Im zweiten Halbjahr 2023 ist geplant ein Manuskript zur Studie *„Direkte Endlagerung von Transport- und Lagerbehältern mit hochradioaktiven Abfällen“* gemeinsam mit T. Hassel (Leibniz Universität Hannover / Institut für Werkstoffkunde) zur Veröffentlichung einzureichen. Die Auswahl, Einstellung und Einarbeitung einer geeigneten Kandidatin oder eines geeigneten Kandidaten für die Promotionsstelle wurde auf das zweite Halbjahr 2023 verschoben. Neben weiteren online Besprechungen im Arbeitspaket TAP HAFF ist eine Teilnahme am TRANSENS Arbeitstreffen 2023 in Kassel vom 20. bis 22. September 2023 geplant.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine im ersten Halbjahr 2023

Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer: Karlsruher Institut für Technologie, Institut für Technikfolgenabschätzung und Systemanalyse		Förderkennzeichen: 02 E 11849E
Vorhabensbezeichnung: Verbundvorhaben: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt E		
Zuordnung zum FuE-Programm: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle – Förderkonzept des BMWi (2015-2018)		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2019 bis 30.09.2024	Berichtszeitraum: 01.01.2023 bis 30.06.2023	
Gesamtkosten des Vorhabens: 2.720.831,00 EUR	Projektleiter: apl. Prof. Dr. Ulrich Smeddinck	

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

In TRANSENS soll transdisziplinär zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland geforscht werden. Die interessierte Öffentlichkeit und andere außerakademische Akteure werden planvoll in Forschungskontexte, konkret in Transdisziplinäre Arbeitspakete (TAP) eingebunden. Die Möglichkeiten transdisziplinärer Forschung in der nuklearen Entsorgung werden im Verbund systematisch reflektiert (Transdisziplinaritätsforschung). Spezielle Aktivitäten zielen auf Nachwuchsförderung und Kompetenzerhalt.

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

Die ITAS-Schwerpunkte liegen im TAP HAFF und im TAP DIPRO mit Grundlagenforschung zu Fragen der Reversibilität und des gesellschaftlichen Dialogs im deutschen Standortauswahlverfahren.

TAP HAFF: „HAndlungsFähigkeit und Flexibilität in einem reversiblen Verfahren“ mit den Themen Pfadabhängigkeit als Risiko und Herausforderung, Raumwirkungen vor dem Hintergrund von Endlager-Governance sowie technische Komponenten von Entsorgungspfaden und deren Nebenfolgen.

TAP DIPRO: „Dialoge und Prozessgestaltung in Wechselwirkung von Recht, Gerechtigkeit und Governance“. Gerechtigkeitsfragen haben insbesondere bei Projekten wie der Standortsuche und der Realisierung eines Endlagers einen hohen gesellschaftlichen Stellenwert.

Zusammenarbeit im Forschungsverbund:

Mit dem TAP SAFE wird empirisch kooperiert. Ebenso kooperiert ITAS im Rahmen der Transdisziplinaritätsforschung mit den TD-Experten innerhalb des Verbundes (I-TD und BegleitTeam.TD).

ITAS ist im Sprecherteam des Forschungsverbundes ebenso vertreten wie in der I-TD (2 Mitarbeiter).

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

TAP HAFF: Die Datenauswertung für das ITAS-AP "Verwaltungshandeln in einem bundesdeutschen reversiblen Verfahren für die aktuelle Suche nach einem Endlagerstandort" ist abgeschlossen und der Bericht liegt als Entwurf vor. Es zeigt sich, dass das „neue“ Verwaltungshandeln unter den Maßgaben des Stand AG und den Vorschlägen der Endlagerkommission vor großen Herausforderungen steht. Sowohl die unterschiedlichen Vorstellungen über ein integratives Vorgehen, das zwischen sicherheitstechnischer Umsetzung einer geologisch anspruchsvollen Tiefenlagerung als auch die Verknüpfung dieses Prozesses mit substantieller Öffentlichkeitsbeteiligung und Transparenz steht, als auch alte Konfliktlinien zwischen Behörden, Fachpolitik und Gesellschaft sind nicht aus der Welt geschafft: Diese Konfliktlinien fordern vielmehr eine konstruktive Weiterentwicklung der Prozessgestaltung. Für die zukünftige Verfahrenspraxis werden entsprechend aus dem AP heraus Merkmale formuliert. Neben diesem ITAS-Themenstrang wurde zu der Fragestellung nach Gelingensbedingungen für das „Denken in Alternativen“ ein Design-Thinking-Workshop „Nukleare Entsorgung – mögliche Wege, richtungsweisende Entscheidungen, zukünftige Herausforderungen“ im Mai 2023 in Berlin durchgeführt. Ausgewählte Praxisakteur:innen berieten die Entwicklung eines gemeinsamen Problemverständnisses und die Erarbeitung von konkreten Lösungsansätzen entlang der Herausforderungen der Gestaltung eines zukunftsfähigen Entsorgungspfad. Es zeigte sich u.a., dass das Thema Kommunikation zentral war und als Bedingung für ein partizipatives und wissenschaftsbasiertes Verfahren als Grundvoraussetzungen eingestuft wurde. Durch die Offenheit des Formates und den geschützten Rahmen wurde ein Reflexionsraum eröffnet, der einen konstruktiven Arbeitsprozess mit drei konkretisierenden Ideen ermöglichte.

Am Sammelband „Entscheidungen für die Zukunft“ (Hg. A. Eckhard, risicare, et al.) arbeiteten bei fünf Beiträgen ITAS-Mitarbeitende als Autoren oder Co-Autoren mit. Der Band ist zur Drucklegung eingereicht.

Beim TRANSENS-Jahrestreffen waren ITAS-Kolleg:innen aus HAFF und DIRPO mit einem Fachvortrag und einem interaktiven „Messestand“ vertreten, der neue Formen des Wissenschaftskommunikation mit den Teilnehmern aus den transdisziplinären Begleitgruppen, Gästen und TRANSENS-Kolleg:innen testete. Bei einer großen STS-Konferenz in Aachen wurden in zwei Vorträgen HAFF-Ergebnisse präsentiert.

TAP DIPRO: Vom AP Recht wurde kontinuierlich an der Kommentierung zum StandAG gearbeitet. Der Werkvertrag über einen Teil der Kommentierungen konnte erfolgreich abgewickelt werden. Andere Publikationen wurde vorbereitet. Im Februar wurde eine interne DIPRO-Konferenz zur Reflexion des Zwischenstandes der Forschung durchgeführt. Der dokumentierende Bericht befindet sich im internen TRANSENS-Review. Am 29.6.23 wurde in Federführung von ITAS/AP Recht ein interdisziplinärer Workshop zur Standortvereinbarung durchgeführt. Carolin Ossenberghat ihr Promotionsprojekt zur Standortvereinbarung im Doktoranden-Seminar an der Universität Halle-Wittenberg vorgestellt.

TAP EDU: Fortführung des ITAS-Textseminars zu einschlägiger Forschungsliteratur bzgl. transdisziplinärer Themen als auch interdisziplinären Vorgehensweisen zu neuen Wissensbeständen für HAFF und DIPRO. ITAS-Vortrag zum Thema Recht in der IRS-Ringvorlesung Hannover sowie Vorträge zusammen mit dem KIT-INE im Rahmen der TAP-übergreifenden Zusammenarbeit mit der TRANSENS-Arbeitsgruppe der TU Berlin zu technoökonomischen Aspekten der nuklearen Entsorgung.

4. Geplante Weiterarbeiten

TAP HAFF:

- Auswertung des Design-Thinking-Workshops Berlin 2023.
- Übertragung der Ergebnisse aus dem Abschlussbericht des ITAS-HAFF-AP „Verwaltungshandeln“ auf die Fragestellung des TAPs „Handlungsfähigkeit und Flexibilität“.
- Fortführen und Planung neuer Weiterbildungsaktivitäten zum Thema „TA und Governance im selbstlernenden Verfahren“ sowie dialogische Beratungen zu den Themen „lernendes Verfahren“.

TAP DIPRO: AP Recht arbeitet primär weiter an der Kommentierung zum StandAG. Ansonsten wird DIPRO-weit mit einer Abfolge von Treffen zur inhaltlichen Auseinandersetzung Workshop F vorbereitet, der den Reigen von die DIPRO-Arbeit strukturierenden Workshops gemäß Projektantrag abschließt.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Kirchhof, Astrid Mignon (2022): *Embodying Fear and Toxicity: Environmental Protests against West Germany's Final Repository for Nuclear Waste in Gorleben, 1977-1980*, in: Simone M. Müller/May-Brith Ohman Nielsen (Hg.), *Hazardous Time-Scapes. How to Study Toxicity and Pollution from Multiple Timed, Spaced, and Embodied Perspectives*, Ecology and History Series, (Athens, Ohio: Ohio University Press), S. 133-252

Kuppler, Sophie (2023): *Atommüll – Zur Long-term Governance eines sozio-technischen Problems*. In: M. Sonnberger, A. Bleicher, M. Groß: *Handbuch Umweltsoziologie*. Wiesbaden: Springer Fachmedien Wiesbaden. 1–13.

Wiesbaden: Springer Fachmedien Wiesbaden. 1–13.

Kuppler, Sophie / Eckhardt, Anne /Hocke, Peter (2023): *Who Decides What is Safe? Experiences from Radioactive Waste Governance in Switzerland*. In: Maarten Arentsen / Dhoya Snijders / Rinie van Est (eds.): *The Future of Radioactive Waste. Governance Lessons from Europe*, Wiesbaden: Springer VS (Series "Energy Policy and Climate Protection"), S. 169-198

6. Vorträge

Hocke, P. (2023a): *Das Institut, die Technikfolgenabschätzung und die Endlagerforschung. Zwischen Basic Research & Politikberatung. Besuch des TRANSENS-Teams der TU Berlin am KIT, 10.2.23, Karlsruhe: ITAS*

Hocke, P. / Enderle, St. (2023b): *Circulation Futures by Narratives and the Limiting Actors of Path-Dependencies. The German Debate on Final Disposal of High Radioactive Waste*.

Aachen 17.3.23. STS HUB, Aachen, March 15th-17th 2023

Kuppler, S.; Hocke, P.; Scheer, D. *How to govern nuclear waste over the next few hundred years? 2023. Italian Society for Social Studies of Science and Technology Italia Conference (STS 2023), Bologna, Italien, 28.-30. Juni 2023*

Scheer, D. *Long-term Governance: towards a framework concept. 2023. STS-Hub.de (2023), Aachen, Deutschland, 15.-17. März 2023*

Scheer, D. *Entsorgungspfade und Implikationen des neuen Zeitplans. 2023. Projekttreffen TRANSENS (2023), Darmstadt, Deutschland, 1.-3. März 2023*

Smeddinck, Ulrich: *Impulsvortrag „Lernendes Verfahren – Perspektiven“, NBG/FG IV, 23.1.23*

Smeddinck, Ulrich: *Standortauswahlgesetz und Öffentlichkeitsbeteiligung, Ringvorlesung „Brennstoffkreislauf, IRS, Universität Hannover, 18.4.23*

Smeddinck, Ulrich: *Das „lernende“ Standortauswahlverfahren – Meine Lernkurve, DAEF-ITAS-Workshop „Lernendes Verfahren – wie setzen wir es gemeinsam um?“, Karlsruhe, 19. Juni 2023*

Smeddinck, Ulrich: *Die Standortvereinbarung aus rechtswissenschaftlicher Sicht, TRANSENS-DIPRO-Workshop „Kooperative Gerechtigkeit – blühende Landschaft?“, ITAS, Karlsruhe, 29. Juni 2023*

Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer: Leibniz Universität Hannover, Welfengarten 1, 30167 Hannover		Förderkennzeichen: 02 E 11849F
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt F		
Zuordnung zum FuE-Programm: Nukleare Entsorgungsforschung BMWi „Schaffung der wissenschaftlich-technischen Grundlagen zur Realisierung eines Endlagers für insbesondere Wärme entwickelnde radioaktive Abfälle“ sowie „Aufbau, Weiterentwicklung und Erhalt der wissenschaftlich-technischen Kompetenz und zur Nachwuchsförderung“; Bereich 5: Wissensmanagement und sozio-technische Fragestellungen, Feld 5.2		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2019 bis 30.09.2024	Berichtszeitraum: 01.01.2023 bis 30.06.2023	
Gesamtkosten des Vorhabens: 3.473.288,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Walther	

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

In TRANSENS soll transdisziplinär geforscht werden: Die interessierte Öffentlichkeit und andere außerakademische Akteure werden planvoll in Forschungskontexte, konkret in Transdisziplinäre Arbeitspakete (TAP) eingebunden. Die Möglichkeiten transdisziplinärer Forschung in der nuklearen Entsorgung werden im Verbund systematisch reflektiert (Transdisziplinaritätsforschung). Spezielle Aktivitäten zielen auf Nachwuchsförderung und Kompetenzerhalt. LUH IRS/IW und ETH Zürich tragen zu allen vier TAP bei: Flexibilität statt linearer Ablauf des Verfahrens: schrittweises Vorgehen, Haltepunkte im Verfahrensablauf, die Option von begründeten Rückschritten und die Reaktion auf neue Forschungsergebnisse sind die Themen der transdisziplinären Forschung im TAP HAFF. Dialog und Diskurs sind Schlüssel zur Verständigung. Wie muss der langwierige Prozess gestaltet werden, um dafür gute Bedingungen auf dem Entsorgungspfad zu schaffen? Das ist Gegenstand der transdisziplinären Forschung im TAP DIPRO. In einem Verfahren, das die Rückholung eingelagerter Abfälle im Falle einer ungünstigen Entwicklung des Lagers vorsieht, muss man sich frühzeitig Gedanken machen über Monitoring-Strategien, Entscheidungswege, Entscheidungsträger und Verantwortlichkeiten. Dies ist Gegenstand des TAP TRUST. Im TAP SAFE wird transdisziplinär untersucht, ob und inwieweit Sichtweisen von Nicht-Spezialisten nahelegen, das Konzept des Safety Case anzupassen oder weiterzuentwickeln, um so die Diskurs- und Beratungsfähigkeit zu verbessern.

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

IRS:

TAP TRUST: Modul 1: Übergreifender Rahmen des TAP TRUST und Leitung der AGBe
Modul 2: Transdisziplinäre Erarbeitung eines Programms zur Umweltüberwachung

TAP SAFE: Modul 6: Die Rolle der radioökologischen Modellierung im Safety Case

EDU: Aus- und Weiterbildung

IW:

TAP HAFF: Modul 1: Pfadabhängigkeit als Risiko und Herausforderung

Modul 2: Raumwirkungen und Governance

Modul 3: Konzeptionelle Grundlagen und Basisinformationen

TAP DIPRO: Workshop D: Darstellung technischer Randbedingungen

Workshop F: Transdisciplinarity meets reality – Lessons learned

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

IRS: TAP TRUST (Modul 1): Zu den Ergebnissen zweier Surveys zur Rolle von Vertrauen und Werten im Endlagerkontext wurden zwei Paper eingereicht. Ergebnisse der Zusammenarbeit mit der AGBe fließen zudem in einen TRANSENS-Sammelband zum Thema TD ein. Daneben wurden weitere AGBe-Workshops durchgeführt, systematisch beobachtet und ausgewertet. AGBe und DBG (TAP DIPRO) haben außerdem gemeinsam einen TAP-übergreifenden Themenblock für das TRANSENS-Projekttreffen (Darmstadt) organisiert und moderiert.

- TAP TRUST (Modul 2): Die Zusammenarbeit mit Bürger*innen sowie eine Reihe öffentlicher Veranstaltungen (z.B. „Wohin mit dem Atommüll?“) rund um das Thema Radioaktivität wurden fortgesetzt. Außerdem wurden Ergebnisse der Bürgermessstelle im Rahmen eines öffentlichen Stammtisches vorgestellt und im Internet veröffentlicht. Im Rahmen von Kooperationen mit Schulen wurden eine Unterrichtseinheit zur Gammaspectrometrie erarbeitet und weitere „hands-on“ Unterrichtseinheiten durchgeführt.

- TAP SAFE (Modul 6): Mit der TUC wurde ein AGBe-Workshop zu „Modellrechnung und Indikatoren“ durchgeführt, wofür ein Webtool zur Darstellung von Parameterungewissheiten bei der Biosphärenmodellierung erstellt wurde. Anhand von Daten aus GRS-Publikationen wurden mit Hilfe des zuvor erstellten Modells auf Basis der Berechnungsgrundlage Dosisabschätzung (BeGru) Beispiele zur Abschätzung der Dosis als Indikator durchgerechnet. Der TRANSENS-Bericht über das BeGru-Biosphärenmodell wurde nahezu fertiggestellt.

- EDU: Die Ringvorlesung wurde und wird wie geplant einmal wöchentlich von abwechselnden Referenten aus dem Projekt gehalten. Der Vorlesungsplan für die Sommerschule wurde wie geplant in Zusammenarbeit mit den Partnern des Projektes und unter Konsultation von BASE, BGE und BGZ erarbeitet.

- IW: TAP HAFF: In Zusammenarbeit mit KIT-INE, TUB-iBMB, ÖI und IW erfolgte die Fortführung der Arbeiten zu Entsorgungspfaden, eine konkretisierte Beschreibung des Pfades der direkten Endlagerung von TLB (mit KIT INE) sowie die Betrachtung der Endlagerfähigkeit des Castorbehälters anhand seiner Konstruktionsmerkmale. Das Modul *Cask Communications* wird bzgl. etwaiger Verzögerung der Standortauswahl diskutiert.

- IW: TAP DIPRO: Im Rahmen der TD-Taskforce wurde mit der DBG gearbeitet. Im Zuge der Konsolidierung und Herstellung der Arbeitsbereitschaft wurde die gewählte Methodik innerhalb von TRANSENS dargestellt und diskutiert. Nach dem Steckbriefspiel begann die Planungsphase für den Workshop D „Freiwilligkeit und Kompensation“. TAP übergreifend wurde zu Ungewissheiten (mit SAFE u. TRUST) gearbeitet, wobei endlagerspezifische Ungewissheiten im disziplinären Blick auf die Endlagerbehältertechnik bearbeitet wurden.

4. Geplante Weiterarbeiten

- IRS: TAP TRUST (Modul 1): Die Arbeiten für den TRANSENS-Bericht zum Thema Transdisziplinarität werden fortgesetzt. Parallel werden Workshops für das safeND Symposium in Berlin konzipiert. Die Vorarbeiten für zukünftige Fachveröffentlichungen laufen.

- TAP TRUST (Modul 2): Ergebnisse der Bachelor-Arbeit (Physik) in Kooperation mit der Bürgerinitiative AufpASSEn e.V. zur Untersuchung des C-14 Gehalt in Baumstämmen sowie Tritium in Stillgewässern sollen den Bürger*innen vorgestellt werden. In Zusammenarbeit mit dem „Strahlenschutz-Stammtisch Braunschweiger Land“ werden weitere öffentliche Veranstaltungen unter Einbezug von Stakeholdern und Öffentlichkeit organisiert und moderiert. Messungen und Schulung in der Bürgermessstelle werden fortgesetzt.

- TAP SAFE (Modul 6): Das für den AGBe-Workshop erstellte Webtool soll weiterentwickelt und bei der safeND im Rahmen einer Posterpräsentation vorgestellt und weiter erprobt werden. Erste exemplarische Fälle zum Radionuklidtransport im Boden sollen modelliert werden. Zudem sind Experimente zum Selentransport geplant, die später zur Modellvalidierung genutzt werden sollen.

- (EDU): Vom 13.08.-20.08.2023 wird die zweite TRANSENS Sommerschule durchgeführt, bei der wir uns durch den Einbezug von Stakeholdern, Laien und Studierenden noch stärker als im vergangenen Jahr der transdisziplinären Vernetzung widmen. Die Ringvorlesung wird erneut für das kommende Semester organisiert. IW: TAP HAFF: Fortführung der TAP-übergreifenden Arbeiten zu Ungewissheiten und Unsicherheiten mit dem Fokus auf der Technischen Barriere. Weitere Aufbereitung einer Wissensbasis zum Themenbereich technische Barriere zur Vorbereitung transdisziplinärer Wissensvermittlung unter dem

Blickpunkt Komplexität/Vollständigkeit vs. Verständlichkeit/Vertrauen. Zeitfaktor im Modul Cask Communications. Konkretisierung der Beschreibungen zu den Pfadabhängigkeiten.

- TAP DIPRO: Weitere Zusammenarbeit mit der DBG zur Vorbereitung und Durchführung des geplanten Workshops F (IM und ITAS), in dem die Ergebnisschau der Lessons Learned erfolgen soll.

5. Berichte, Veröffentlichungen

U.a.: (1) Drögemüller, C., Seidl, R., & Walther, C. (submitted). Social values and Individual Judgments on the Final Disposal of High-Level Radioactive Waste in Germany. *Journal of Risk Research*. (2) Hassel, T., et al. (2021): Sicherheitsrelevante Barrieren bei der Endlagerung: Ungewissheiten aus der Perspektive der Ingenieurwissenschaften. TRANSENS-Bericht-04. ISSN (Online): 2747-4186. DOI: 10.21268/20211129-0.

Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer: Öko-Institut e. V., Rheinstraße 95, 64295 Darmstadt		Förderkennzeichen: 02 E 11849G
Vorhabenbezeichnung: Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt G		
Zuordnung zum FuE-Programm: FuE Bereich 2: Wissenschaftliche Grundlagen der Standortauswahl (Feld 2.3) FuE Bereich 3. Endlagerkonzepte und Endlagertechnik (Felder 3.1 und 3.4) FuE Bereich 4 Sicherheitsnachweis (Felder 4.2 und 4.4)		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2019 bis 30.09.2024	Berichtszeitraum: 01.01.2023 bis 30.06.2023	
Gesamtkosten des Vorhabens: 505.379,00 EUR	Projektleiterin: Julia Neles	

1. Vorhabenziele / Bezug zu anderen Vorhaben

In TRANSENS soll transdisziplinär geforscht werden: Die interessierte Öffentlichkeit wird planvoll in Forschungskontexte, konkret in vier Transdisziplinäre Arbeitspakete (TAP) eingebunden. Die Möglichkeiten transdisziplinärer Forschung in der nuklearen Entsorgung werden im Verbund systematisch reflektiert (Transdisziplinaritätsforschung). Weitere Aktivitäten zielen auf Nachwuchsförderung und Kompetenzerhalt. Die Expertise des Öko-Instituts wird insbesondere in die TAPs HAFF und SAFE einbezogen.

Das TAP HAFF fokussiert auf die Flexibilität des Verfahrens, die statt eines linearen Ablaufs, ein schrittweises Vorgehen ermöglicht, das Haltepunkte im Ablauf und die Option von Rücksprüngen sowie die Reaktion auf neue Forschungsergebnisse vorsieht. Das TAP SAFE fokussiert u.a. auf Fragen der Kommunikation und des Umgangs mit Ungewissheiten im Rahmen des Safety Case (SC). Dabei wird transdisziplinär untersucht, ob und inwieweit Sichtweisen von Nicht-Spezialisten nahelegen, das Konzept des SC anzupassen oder weiterzuentwickeln.

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

TAP HAFF: Handlungsfähigkeit und Flexibilität in einem reversiblen Verfahren

Das TAP gliedert sich in drei Module und beinhaltet folgende Arbeitsschritte:

- a) Literaturrecherche,
- b) Experten-Interviews zu Raumwirkungen von kerntechnischen Entsorgungsanlagen,
- c) Transdisziplinärer Workshop mit Praxisakteuren zu Umgang mit räumlichen Transformationen, Entwicklung eines raumsensiblen Long-term Governance-Konzeptes
- d) Visuelles Experiment zur Wirkung von räumlichen Transformationen (Landschaftswandel) mit Praxisakteuren,
- e) Transdisziplinärer Workshop mit Stakeholdern und interessierter Öffentlichkeit zur Prüfung und Weiterentwicklung der konzeptionellen Ideen,
- f) Analyse der Interviews zur Entwicklung partizipativer Ausgestaltungsempfehlungen; Erfahrungen aus dem Schweizer Fall,
- g) Synthese der Ergebnisse und Entwicklung von Handlungsempfehlungen zum Umgang mit raumzeitlichen Spezifika unter Berücksichtigung von Haltepunkten und Rücksprüngen.

TAP SAFE: Stakeholder-Perspektiven und Transdisziplinarität

Das TAP gliedert sich in sieben Module, an vier Modulen ist das Öko-Institut beteiligt. Das Öko-Institut unterstützt mit eigenen Arbeiten den Diskurs.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Vom 1.3. bis 3.3.23 fand das TRANSENS Gesamttreffen in Darmstadt statt. Es wurde vom Öko-Institut ausgerichtet und zusammen mit dem Organisationsteam vorbereitet. Weitere Treffen sowohl in Präsenz als auch virtuell fanden für übergeordnete und organisatorische Aufgabenstellungen sowie in den TAPs statt.

TAP HAFF: Modul 1: Aus den Arbeiten zu den Zukunftspfaden wurden vier Teilprojekte zur vertieften Bearbeitung abgeleitet. Das Team vom Öko-Institut befasst sich mit der Neugenehmigung von Zwischenlagern nach 40 Jahren Betriebszeit.

Modul 2: Derzeit werden die Ergebnisse des Workshops "Wahrnehmungen von Oberflächenanlagen eines Endlagers" ausgewertet und mit den Erkenntnissen aus den Interviews verknüpft. Hierzu wird aktuell ein TRANSENS-Bericht erstellt. Zudem ist die Publikation mit dem Titel „Governing Nuclear Waste in the Long-term: On the Role of Place“ im Journal Historical Social Research eingereicht und wird voraussichtlich in diesem Jahr erscheinen.

TAP SAFE: Fortsetzung der fachlichen Unterstützung der Diskussion um inter- und transdisziplinäre Formate; im Hinblick auf die Diskussion „menschlicher Aktivitäten“ bezüglich Langzeitsicherheit und Safety Case ist zum Schwerpunkt Managementanforderungen und Lernen ein interdisziplinärer TRANSENS Bericht in Vorbereitung. Aktuelle Erkenntnisse wurden im Mai dem TAP SAFE Team vorgestellt und diskutiert.

4. Geplante Weiterarbeiten

TAP HAFF: In Modul 1 werden die identifizierten Teilprojekte bearbeitet. Die Arbeiten zu den Langfassungen der Pfadbeschreibungen werden fortgesetzt. In Modul 2 wird der Fokus auf der Auswertung des Workshops und der Verknüpfung mit den bisherigen Interviewergebnissen und Regionen-Workshops liegen sowie der Vorbereitung und Finalisierung von Publikationen und der Vorbereitung und Durchführung eines Reflexions-Workshops mit Praxispartner*innen, welcher für das Quartal 1 2024 geplant wird, liegen. Robuste Zwischenergebnisse werden auf der Konferenz safeND 2023 im September vorgestellt werden.

TAP SAFE: In SAFE 2 wird der TRANSENS Bericht zu Managementanforderungen und Lernen erstellt, welcher dann in einem weiteren Fokusgruppen-Format mit Expert*innen des SC diskutiert werden soll.

5. Berichte, Veröffentlichungen

keine

Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer: Technische Universität Berlin – Fachgebiet Wirtschafts – und Infrastrukturpolitik		Förderkennzeichen: 02 E 11849H
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: „Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt H		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung radioaktiver Abfälle		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2019 bis 30.09.2024	Berichtszeitraum: 31.01.2023 bis 30.06.2023	
Gesamtkosten des Vorhabens: 362.577,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Christian von Hirschhausen	

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

In TRANSENS soll transdisziplinär geforscht werden: Die interessierte Öffentlichkeit und andere außerakademische Akteure werden planvoll in Forschungskontexte, konkret in Transdisziplinäre Arbeitspakete (TAP) eingebunden.

Die Möglichkeiten transdisziplinärer Forschung in der nuklearen Entsorgung werden im Verbund systematisch reflektiert (Transdisziplinaritätsforschung). Spezielle Aktivitäten zielen auf Nachwuchsförderung und Kompetenzerhalt.

Dialog und Diskurs sind Schlüssel zur Verständigung. Wie muss der langwierige Prozess gestaltet werden, um dafür gute Bedingungen auf dem Entsorgungspfad zu schaffen? Das ist Gegenstand der transdisziplinären Forschung im TAP DIPRO.

Das Fachgebiet für Wirtschafts- und Infrastrukturpolitik erarbeitet im TAP DIPRO auf der Grundlage disziplinärer und interdisziplinärer Forschung eine Bewertung der volkswirtschaftlichen Vorteilhaftigkeit von Organisationsmodellen bzw. Governance-Strukturen an der Schnittstelle zwischen den Prozessen des Rückbaus, der Lagerung und der Standortsuche. Unter Berücksichtigung ingenieurwissenschaftlicher Erkenntnisse sollen mögliche Synergieeffekte und Hindernisse, die eventuell Verzögerungen oder Kostensteigerungen verursachen könnten, herausgearbeitet werden. Des Weiteren erarbeitet bzw. eruiert das Fachgebiet, basierend auf Wissen über monetäre und nicht-monetäre Anreizstrukturen in Kooperation mit anderen Partnern verschiedene Kompensationsszenarien und gesellschaftliche Möglichkeiten distributiver Gerechtigkeit im Umgang mit Lasten- und Verantwortungsverteilung.

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

Das Arbeitsprogramm des TAP DIPRO gliedert sich in drei Module, wovon ein Modul der wissenschaftlichen Vorbereitung und ein Modul der Synthese dient. Im Zentrum steht das Praxismodul mit einer Reihe aus drei Workshops für Teilnehmer aus dem nicht-akademischen Bereich, in denen jeweils unterschiedliche Aspekte von Gerechtigkeit, Recht und Governance behandelt werden. Bei der Workshop-Organisation wechseln sich die DIPRO-Partner ab. Alle Projektpartner (im TAP DIPRO) sind bei den Workshops vertreten.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- Fabian Präger und Prof. Dr. Christian von Hirschhausen nahmen am 16.02.2023 an der DIPRO Konferenz teil, auf der der aktuelle Stand von transdisziplinären Begleitprodukten sowie des Papiers „Atomwende? Ja, bitte! [...]“ (s.u.) vorgestellt wurde.
- Prof. Dr. Christian von Hirschhausen nahm am 28.02.2023 am Teamleitertreffen des TRANSENS-Konsortiums in Darmstadt teil. Es wurde ein in-person am Workshop zur Reflexion über Erreichtes und Perspektiven der TD-Forschung vorgeschlagen und die Notwendigkeit der Aufrechterhaltung der TD-Forschung im Kontext der radioaktiven Entsorgung, auch in Form möglicher Folgeprojekte, thematisiert.
- Fabian Präger und Prof. Dr. Christian von Hirschhausen besuchten das TRANSENS-Treffen in Darmstadt vom 01.-03.03.2023. Diverse Konsortiumsmitglieder stellten (vorläufige) Ergebnisse, u.a. aus dem im Oktober 2022 durchgeführten Workshop im Berliner Naturkundemuseum, an dem Fabian Präger und Prof. Dr. Christian von Hirschhausen im Rahmen von DIPRO mitgewirkt hatten, vor.
- Das transdisziplinäre Begleitprodukt „Einfach mal abschalten...und dann?“ wurde gemeinsam mit Studierenden der TUB finalisiert und am 2. März 2023 beim Verlag „oekom“ veröffentlicht (ISBN: 978-3-98726-030-8). Die Präsentation der dazugehörigen Wanderausstellung auf der e-Ventschau im August 2023 wurde gemeinsam mit den Studierenden vorbereitet.
- Der TD-Beauftragte Fabian Präger reiste am 31.03.2023 nach Greifswald, um an der DIPRO-Veranstaltung zur Standortverantwortung und Zwischenlagerung „Wie lange ist „Zwischen“?“ teilzunehmen. Am 01.04.2023 fand ein Bürgergespräch im Rahmen der TD-Arbeit statt, dem Fabian Präger beiwohnte.
- Fabian Präger und Prof. Dr. Christian von Hirschhausen haben das Papier „Atomwende? Ja, bitte! Warum die Abkehr von der Atomenergie und eine gute Entsorgungspolitik die Energiewende in Deutschland befördern werden“ zusammen mit Achim Brunnengräber vom Team FFN im Mai 2023 in der Zeitschrift „Gaia“ veröffentlicht (DOI: 10.14512/gaia.32.1.3).
- Fabian Präger besuchte am 11. und 12.05.2023 den internen DIPRO-Workshop in Hannover, auf dem über dem TRANSENS-Projekt nachfolgende Forschung diskutiert wurde. Insbesondere die (rechtlichen) Konsequenzen einer „long-term governance“ und weiterer Verzögerungen im Suchprozess sowie Auswirkungen auf nachhaltige Entwicklungen (i.e. „planetare Grenzen“) wurden diskutiert.
- Fabian Präger nahm weiterhin an regelmäßigen digitalen Austauschtreffen im Rahmen des DIPRO-Teilprojekts teil. Insbesondere die Vorbereitung des für November 2023 anvisierten Workshops F, in dem die Arbeiten und Ergebnisse von DIPRO reflektiert und ausgewertet werden sollen, stand im Fokus.
- Prof. Dr. Christian von Hirschhausen hat die Arbeit am Papier „Ökonomische Herausforderungen beim Rückbau von Kernkraftwerken und der Entsorgung radioaktiver Abfälle: Ordnungspolitischer Handlungsbedarf bei der langfristigen Governance“ aufgenommen, welches in der Zeitschrift „Perspektiven der Wirtschaftspolitik“ veröffentlicht werden soll.
- Im Frühjahr 2023 wurden zwei Teilzeitstellen (1x 50%, 1x 75%) für wissenschaftliche Mitarbeiter*innen ausgeschrieben. Bewerbungsgespräche wurden im Juli 2023 geführt und zwei geeignete Kandidatinnen wurden gefunden, deren Einstellung jeweils für September 2023 eingeplant ist.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Fortsetzung der inter- und transdisziplinären Diskursanalyse im Austausch mit TAP HAFF
- Austausch mit TAP HAFF zur Entsorgungspfade insbesondere über die Technologieoptionen und Pfadabhängigkeiten sowie Diskussion zur Atomwende

- Vorbereitung der Reflexion und Aufarbeitung der abgeschlossene sowie Vertiefung der laufenden inter- und transdisziplinären Arbeiten in DIPRO
- Einarbeitung der neuen Mitarbeiter*innen ab September 2023

5. Berichte, Veröffentlichungen

Camurdas, Lena-Jülide, Reni Safitri, Insa Zillmann, Fabian Präger, Alexander J. Wimmers, Christian von Hirschhausen, Alexander Tetsch, und Sibylle Tetsch. 2023. Einfach mal abschalten - und dann? Die Geschichte der deutschen Atomkraft und ihr radioaktives Erbe. München: oekom verlag.

Präger, Fabian, Achim Brunnengräber, und Christian Von Hirschhausen. 2023. „Atomwende? Ja, bitte! Warum Die Abkehr von der Atomenergie und eine gute Entsorgungspolitik die Energiewende in Deutschland befördern werden“. GAIA - Ecological Perspectives for Science and Society 32 (1): 86–90. <https://doi.org/10.14512/gaia.32.1.3>.

Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer: TU Braunschweig, Postfach 3329, 38023 Braunschweig		Förderkennzeichen: 02 E 11849I
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt I		
Zuordnung zum FuE-Programm: Bereich 5: Wissensmanagement und sozio-technische Fragestellungen		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2019 bis 30.09.2024	Berichtszeitraum: 01.01.2023 bis 30.06.2023	
Gesamtkosten des Vorhabens: 1.239.091,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr.-Ing. Stahlmann	

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Im Verbundvorhaben TRANSENS wird erstmalig in Deutschland transdisziplinäre Forschung zur nuklearen Entsorgung in größerem Maßstab betrieben. Die interessierte Öffentlichkeit und andere außerakademische Akteure werden planvoll in Forschungskontexte, konkret in Transdisziplinäre Arbeitspakete (TAP) eingebunden:

- HAFF: Handlungsfähigkeit und Flexibilität in einem reversiblen Verfahren
- SAFE: Safety Case: Stakeholder-Perspektiven und Transdisziplinarität
- TRUST: Technik, Unsicherheiten, Komplexität und Vertrauen
- DIPRO: Dialoge und Prozessgestaltung in Wechselwirkung von Recht, Gerechtigkeit und Governance

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

In einem Verfahren, das die Rückholung eingelagerter Abfälle im Falle einer ungünstigen Entwicklung des Lagers vorsieht, muss man sich frühzeitig Gedanken machen über Monitoring-Strategien, Entscheidungswege, Entscheidungsträger und Verantwortlichkeiten. Dies ist Gegenstand des TAP TRUST.

Flexibilität statt linearer Ablauf des Verfahrens: schrittweises Vorgehen, Haltepunkte im Verfahrensablauf, die Option von begründeten Rückschritten und die Reaktion auf neue Forschungsergebnisse sind die Themen der transdisziplinären Forschung im TAP HAFF.

Dialog und Diskurs sind Schlüssel zur Verständigung. Wie muss der langwierige Prozess gestaltet werden, um dafür gute Bedingungen auf dem Entsorgungspfad zu schaffen? Das ist Gegenstand der transdisziplinären Forschung im TAP DIPRO.

Das IGG der TU Braunschweig ist in TAP TRUST eingebunden und bearbeitet Fragestellungen zu Monitoring und zur Akzeptabilität von Ungewissheiten während der Beobachtungsphase und einer Rückholung.

Das iMBM der TU Braunschweig ist in den TAPs HAFF und DIPRO eingebunden und entwickelt und visualisiert dazu idealtypische Konzepte für obertägige Anlagen von Endlagern. Dabei wird der komplette Lebenszyklus der Bauwerke betrachtet. Wesentliches Element ist dabei ein lernfähiges Lebenszyklusmanagementsystem.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Am IGG wurden die Arbeiten am Demonstrator „Rückholung“ fortgesetzt. Die Erkenntnisse aus dem AGBe-Workshop von 21.-22.10.2022 wurden systematisch ausgewertet und sollen innerhalb eines Beitrags innerhalb des Bearbeiter:innensammelbands von TRANSENS veröffentlicht werden. Weiterhin wurde eine Masterarbeit zur Anwendbarkeit des numerischen Workflows auf ein alternatives Endlagersystem (Bure anstatt Opalinuston) durchgeführt. Das Konzept zum Bürgergutachten der AGBe wurde auf dem AGBe-Monitoring-Workshop am 6.5.2023 vorgestellt und wird weiter konkretisiert. Im Bürgergutachten soll die Perspektive auf die Rückholung der AGBe dargestellt werden.

Der Buchbeitrag mit dem Titel „Trittsicherheit trotz Unsicherheit? Strategien der Ungewissheitsbewältigung bei nuklearen Entsorgungspfaden“ im Sammelband „Entscheidungen für die Zukunft: Ungewissheiten bei der Entsorgung hochradioaktiver Abfälle“ wurde finalisiert und zur Veröffentlichung eingereicht.

Auf dem TRANSENS Projekttreffen in Darmstadt vom 1.3.-3.3.2023 hat sich das iBMB gemeinsam mit dem Öko-Institut und der Universität Kassel mit dem visuellen Experiment zur Raumwirkung von Oberflächenanlagen am Wissensmarktplatz beteiligt, die dafür entwickelten 3d-Modelle wurden präsentiert und diskutiert. Das IGG beteiligte sich mit einem Resümee über die zwei transdisziplinären Workshops zum Thema Rückholung und Ungewissheiten.

Das iBMB hat im TAP DIPRO gemeinsam mit den Projektpartnern von der Universität Kiel vom 31.3.-01.04.2023 den 2. Workshop der Reihe E mit dem Titel „Wie lange ist zwischen?“ zu Zukunftsfragen und der Standortverantwortung von Zwischenlagern im Kontext der Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Greifswald durchgeführt. In dieser Workshop-Reihe wird die notwendige Verlängerung der Zwischenlagerung in der Verwirklichung eines Entsorgungspfades am Standort von Zwischenlagern untersucht und im Austausch mit hiervon betroffenen Einwohnenden der Standortgemeinden und Beschäftigten von Entsorgungseinrichtungen diskutiert.

Das iBMB beteiligte sich am ersten Tag mit einem Impulsvortrag zum Thema der Alterung von Zwischenlagerbauwerken und deren Bedeutung für den Endlagerpfad und am zweiten Tag durch einen Moderationsbeitrag im Bürgergespräch.

Am 09.05.2023 fand innerhalb der Ringvorlesung „Nachhaltigkeit im Bauwesen“ an der TU Braunschweig ein transdisziplinärer Workshop im World-Café-Format mit dem Titel „Geotechnik im Spannungsfeld der Nachhaltigkeit“ zum Thema Entsorgungsoptionen für hochradioaktive Abfälle statt, der unterstützt vom iBMB und TUC-GEMS vom IGG organisiert und durchgeführt wurde.

4. Geplante Weiterarbeiten

Das Bürgergutachten der AGBe soll innerhalb des zweiten Quartals in seinen wesentlichen Punkten erarbeitet werden, weitere Arbeiten am Demonstrator Rückholung sind vorgesehen. Innerhalb der Workshop-Reihe E des TAP DIPRO haben die Vorbereitungen zur Durchführung des 3. Workshops begonnen. Der Workshop E3 wird vom 22.09.-23.09.2023 in Kassel stattfinden.

Weiterhin werden diverse studentische Arbeiten zu den Themen Rückholung, Ungewissheiten, sowie Lebensdauermanagement und Dauerhaftigkeit mit dem Schwerpunkt auf Schädigungs- und Alterungsmechanismen bei Stahlbetonbauwerken betreut.

5. Berichte, Veröffentlichungen

M. Mbah, S. Bremer, H. Muxlhanga (2023): Perceptions of surface facilities of a potential disposal site and the role of place attachment, 2nd international research symposium on the safety of nuclear waste management safeND, Berlin, 13.-15. September 2023

D. Scheer, F. Becker, T. Hassel, P. Hocke, T. Leusmann, V. Metz: Trittsicherheit auf Zukunftspfaden? Ungewissheitsbewältigung bei der Entsorgung hochradioaktiver Abfälle. In: Eckhardt A, Becker F, Mintzclaff V, Scheer D, Seidl R (2023) Entscheidungen für die Zukunft: Ungewissheiten bei der Entsorgung hochradioaktiver Abfälle. Springer Verlag

Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer: Universität Kassel, Arbeits- und Organisationspsychologie		Förderkennzeichen: 02 E 11849J
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt J		
Zuordnung zum FuE-Programm: Nukleare Entsorgungsforschung - BMWi		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2019 bis 30.09.2024	Berichtszeitraum: 01.01.2023 bis 30.06.2023	
Gesamtkosten des Vorhabens: 327.569,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. habil. Oliver Sträter	

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

In TRANSENS soll transdisziplinär geforscht werden: Die interessierte Öffentlichkeit und andere außerakademische Akteure werden planvoll in Forschungskontexte, konkret in vier Transdisziplinäre Arbeitspakete (TAP) eingebunden. Die Möglichkeiten transdisziplinärer Forschung in der nuklearen Entsorgung werden im Verbund systematisch reflektiert; spezielle Aktivitäten zielen auf Nachwuchsförderung und Kompetenzerhalt.

Im TAP HAFF soll Flexibilität statt ein linearer Ablauf des Verfahrens erarbeitet werden durch ein schrittweises Vorgehen, mit Haltepunkten im Verfahrensablauf, der Option von begründeten Rückschritten und Reaktion auf neue Forschungsergebnisse.

Im TAP SAFE wird untersucht, ob und inwieweit Sichtweisen von Nicht-Spezialisten nahelegen, das Konzept des Safety Case anzupassen oder weiterzuentwickeln, um so die Diskurs- und Beratungsfähigkeit zu verbessern. Weiterhin wird untersucht, ob und inwieweit Sichtweisen von Nicht-Spezialisten nahelegen, das Konzept des Safety Case anzupassen oder weiterzuentwickeln, um so die Diskurs- und Beratungsfähigkeit zu verbessern.

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

Das Fachgebiet Arbeits- und Organisationspsychologie beteiligt sich insbesondere am TAP HAFF und TAP SAFE mit folgenden Arbeitspaketen:

- HAFF AP 1: Psychologische Aspekte bei der Entscheidungsfindung für Haltepunkte und Rückschritte.
- HAFF AP 2: Unterstützung des schrittweisen Verfahrens hinsichtlich einer positiven Sicherheits- und Fehlerkultur.
- HAFF AP 3: Anwendung der Methodik auf Szenarien.

sowie

- SAFE AP 1: Bestandsaufnahme ganzheitlicher, systemischer Effekte der menschlichen Zuverlässigkeit auf den Umgang mit Sicherheitsanforderungen.
- SAFE AP 2: Methode zur Berücksichtigung der Aspekte der menschlichen Zuverlässigkeit in den Einschätzungen und Bewertungen von Ungewissheiten.
- SAFE AP 3: Anwendung der Methodik auf Modellrechnungen und Ergebnisdiskussionen.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

HAFF AP 1: Vorbereitung der TRANSENS Summer School (mit TAP EDU).

HAFF AP 2: TRANSENS Ringvorlesung (TAP EDU) zu den Auswirkungen der zeitlichen Verschiebung auf die Sicherheitskultur der zentralen Akteure.

HAFF AP 3: Vorbereitung und Durchführung des Projekttreffens in Darmstadt (mit Oeko Institut und TUC); Stand zum visuellen Experiment (mit Oeko Institut und TU Braunschweig) beim Wissensmarktplatz mit dem Thema „Indikatoren & Datenvisualisierung“.

HAFF AP 3: Auswertung der Aspekte der Kommunikationskultur aus dem Visuellen Experiment zu Fragestellungen zum Raumempfinden (mit Oeko Institut und TU Braunschweig).

SAFE AP 2: Vorstellung der Aspekte menschlicher Zuverlässigkeit anhand ausgewählter Anforderungen aus der Synopse zu den BMU Sicherheitsanforderungen auf der Tagung Technische Zuverlässigkeit (TTZ) sowie Organisation und Vorbereitung einer Session zur Endlagerung mit der BGE auf der TTZ (Keynote, Session und Panel-Diskussion).

SAFE AP 3: Weitere Anwendung der Methodik zur Bewertung des Einflusses menschlicher Zuverlässigkeit auf die zeitliche Verschiebung in der Endlagersuche.

4. Geplante Weiterarbeiten

HAFF AP 3: Veröffentlichung der Aspekte der Kommunikationskultur aus dem Visuellen Experiment zu Fragestellungen zum Raumempfinden (mit Oeko Institut und TU Braunschweig).

HAFF AP 3: Teilnahme am Forum Endlagersuche (17. bis 18.11.23) mit Fokus auf Bedeutung transdisziplinärer Methoden und menschlicher Zuverlässigkeit in der Endlagerforschung.

HAFF AP 3: Weiterentwicklung der transdisziplinären Methode mit Hilfe multimedialer Unterstützung durch den virtuellen Raum und Ausarbeitung und Anwendung entsprechender transdisziplinärer Szenarien, um die Wirksamkeit der transdisziplinären Ansätze zu erhöhen.

HAFF AP 3: Vorbereitungen eines Podcast zum Projektüberblick von TRANSENS, ausgehend von anfänglichen Fragestellungen zu Narrativen, Gerechtigkeit bis hin zu Fragen der Endlager- und Behälterkonzeption, Rückholbarkeit, Partizipation und Wissenserhalt künftiger Generationen. Geplant als diskursives Format.

SAFE AP 1: Zwischenergebnisse des Berichtes mit Empfehlungen für die Berücksichtigung der menschlichen Zuverlässigkeit beim Umgang mit den BMU Sicherheitsanforderungen werden weiterbearbeitet und mit den Beiträgen der TTZ integriert.

SAFE AP 2: Aspekte menschlicher Zuverlässigkeit anhand ausgewählter Anforderungen aus der Synopse zu den BMU Sicherheitsanforderungen werden zur öffentlichen Diskussion gestellt (als Bestandteil des AP 1).

SAFE AP 2: Der Beitrag Umgang mit Modellierungsungewissheiten zum Sammelband ‚Ungewissheiten‘ des TRANSENS Projektes wurde fertiggestellt.

SAFE AP 3: Die Methodik zur Bewertung des Einflusses menschlicher Zuverlässigkeit bei Endlager-Fragestellungen in der Modellierung wird weiterentwickelt (aus Basis des Vortrages auf dem Trust in Models Workshop der BASE) und soll zu einem TRANSENS-Sammelband führen (mit HAFF AP 1). Dort wird auch der ursprünglich anvisierte Beitrag zum Sammelband Ungewissheiten des TRANSENS Projektes (Grenzen des Barrieredenkens und Faktor Mensch) integriert.

SAFE AP 3: Vorbereitungen zum Arbeitstreffen in Kassel und Besuch des Zwischenlagers in Würgassen werden durchgeführt. Programm besteht aus bisheriger Projektzusammenfassung, Besichtigung eines ehemaligen Kernkraftwerks und geplantem Logistikzentrum Würgassen und Ausblick auf weitere Forschungsschwerpunkte für die kommende Zeit.

5. Berichte, Veröffentlichungen

- Sträter, O. (2023) Menschliche Zuverlässigkeit und Sicherheitskultur im Endlagerprozess. TRANSENS Ringvorlesung. Hannover.
- Sträter, O. (2023). Low Probability Ereignisse als Resultat unberücksichtigter Wechselwirkungen zwischen menschlicher und technischer Zuverlässigkeit und deren

Bedeutung für die Endlagerung hochradioaktive Abfälle und autonomer Systeme. Key-Note. TTZ 23 in Nürtingen. VDI. Düsseldorf.

- Seidel, L. & Straeter, O. (2023) Resiliente Ausrichtung von Managementsystemen in der Endlagersuche. TTZ 23. Nürtingen. TTZ 23 in Nürtingen. VDI. Düsseldorf.
- Othmer, A. & Muxlhanga, H., Lux, K.-H. & Sträter, O. (2023, in press). Umgang mit Modellierungungewissheiten. Beitrag zum Sammelband ‚Ungewissheiten‘ des TRANSENS Projektes.

Beiträge zur 31. VDI-Fachtagung Technische Zuverlässigkeit 2023 - Entwicklung und Betrieb zuverlässiger Produkte - am 26. und 27. April 2023, Nürtingen bei Stuttgart

Plenarvortrag: Low Probability Ereignisse als Resultat unberücksichtigter Wechselwirkungen zwischen menschlicher und technischer Zuverlässigkeit und deren Bedeutung für die Endlagerung hochradioaktiver Abfälle und autonomer Systeme

- Prof. Dr. phil. habil. Oliver Sträter
Podiumsdiskussion: Energiewende – Herausforderungen für Zuverlässigkeit und Sicherheit in der Energieversorgung
- Dipl.-Ing. Daniel Clemens, Reliability Technical Manager, SMA Solar Technology AG, Niestetal
- Prof. Dr.-Ing. Kai Hufendiek, Institutsleiter, Professor für Energiewirtschaft und Energiesysteme, Energiemärkte und Intelligente Systeme, Universität Stuttgart
- Prof. Dr. phil. habil. Oliver Sträter, Leiter des Fachgebiets Arbeits- und Organisationspsychologie, Fachbereich Maschinenbau, Universität Kassel
- Prof. Dr.-Ing. Stefan Weihe, Geschäftsführender Direktor, Materialprüfungsanstalt MPA, Institut für Materialprüfung, Werkstoffkunde und Festigkeitslehre, Universität Stuttgart

Moderation: Prof. Dr.-Ing. Peter Zeiler, Leiter des Forschungsbereichs

Zuverlässigkeitstechnik und Prognostics and Health Management, Fakultät Maschinen und Systeme, Hochschule Esslingen, Göppingen

Session: Sicherheitsaspekte, Menschliche Zuverlässigkeit und organisationale Resilienz bei der Endlagersuche (Moderation: Oliver Sträter)

Vortrag 1: Resiliente Ausrichtung von Managementsystemen in der Endlagersuche

- Lisa Seidel, Leiterin Bereich Standortauswahl, BGE Bundesgesellschaft für Endlagerung mbH, Peine; mit Oliver Sträter

Vortrag 2: Auslegung und Entwicklung von Endlagerbehältern für hochradioaktive Abfälle und deren Konditionierung

- Dipl.-Phys. Sabine Prignitz, Gruppenleiterin Übertägige Anlagenplanung, Endlagerplanung, BGE; mit Thomas Bever, Abteilungsleiter Endlagerplanung, BGE, Peine

Vortrag 3: Sicherheitskonzept und abgeleitete Stilllegungsmaßnahmen für das ERAM

- Matthias Ranft, Bereichsleiter, Stilllegungsmaßnahmen, BGE, Peine; Dr. Antje Carstensen, Gruppenleiterin, Stilllegungsmaßnahmen, BGE, Peine; Matthias Mohlfeld, Abteilungsleiter, Stilllegung, BGE, Salzgitter

Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer: Forschungszentrum Jülich GmbH, 52425 Jülich		Förderkennzeichen: 02 W 6279
Vorhabensbezeichnung: Neu- und Weiterentwicklung von Konzepten, Methoden und Techniken für die internationale Kernmaterialüberwachung, insbesondere im Rahmen der nuklearen Entsorgung (SAFEGUARDS-3)		
Zuordnung zum FuE-Programm: Bereich D3: Kernmaterialüberwachung (Safeguards), Feld: 3.1		
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2019 bis 31.12.2024	Berichtszeitraum: 01.01.2023 bis 30.06.2023	
Gesamtkosten des Vorhabens: 889.554,00 EUR	Projektleiter: Dr. Irmgard Niemeyer	

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Die Bundesregierung soll in ihren Bemühungen unterstützt werden, in Zusammenarbeit mit der IAEO und Euratom das Verifikationssystem zur Nichtweiterverbreitung von Kernwaffen weiterzuentwickeln. Neben der ständigen Verbesserung der Effektivität des Überwachungssystems spielen Gesichtspunkte des Kontrollaufwandes (Effizienz) eine zentrale Rolle. Dieser Aspekt hat besondere Bedeutung bei der erweiterten Aufgabenstellung der IAEO durch das Zusatzprotokoll im Hinblick auf die Entdeckung undeckelter Nuklearmaterialien und Nuklearaktivitäten.

Das Vorhaben baut auf den Ergebnissen der vorangegangenen Vorhaben 02W6184, 02W6218, 02W6232, 02W6243, 02W6259 und 02W6263 auf. Die Arbeiten haben Bezug zum BMWi-Förderkonzept „Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle - (2015-2018)“, zu den strategischen Zielen des 7. Energieforschungsprogramm der Bundesregierung (2018) im Rahmen der Entsorgungs- und Endlagerforschung, zum Nationalen Entsorgungsprogramm (2015) sowie zum BMWi-IAEA Joint Programme. Die Arbeiten werden in enger Abstimmung zwischen Regierung, den Kontrollbehörden IAEO und Euratom, Industrie sowie Forschung und Entwicklung geplant und durchgeführt.

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

- 6.1 Konzepte zur Kernmaterialüberwachung
 - AP 6.1.1 Safeguards-Konzepte für verlängerte Zwischenlagerzeiten
 - AP 6.1.2 Safeguards-Konzepte für unterschiedliche Endlagerkonzepte
 - AP 6.1.3 Safeguards-Konzepte für kerntechnische Anlagen im Rückbau
- 6.2 Methoden und Techniken zur Kernmaterialüberwachung
 - AP 6.2.1 Einschluss und Überwachung
 - AP 6.2.2 Erneute Behälterüberprüfung (Re-Verifikation)
 - AP 6.2.3 Methoden zur Entdeckung von unabhängigen Bergbauaktivitäten und Hohlräumen
 - AP 6.2.4 Geoinformationstechnologien
- 6.3 Kooperation, Kommunikation, Kapazitätsaufbau zur internationalen Kernmaterialüberw.
 - AP 6.3.1 Kooperation mit der Deutschen Gesellschaft für Auswärtige Politik (DGAP)
 - AP 6.3.2 Pflege des nationalen Safeguards-Internet-Portals
 - AP 6.3.3 Nationale Gremien
 - AP 6.3.4 Internationale Gremien

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP 6.1.1: Erarbeitung der konzeptionellen und technischen Anforderungen an die Safeguardsüberwachung der Zwischenlager in Deutschland bis mindestens 2050
- AP 6.1.2: Vorbereitung eines Promotionsprojekts zum Einsatz eines Digitalen Zwillings im Rahmen der Safeguardsüberwachung eines HAW-Endlagers
- AP 6.1.3: Beratung von Anlagenbetreibern zur Safeguardsüberwachung von Anlagen im Rückbau
- AP 6.2.1: Auswertung von Feldtests zur Eignung von 2D und 3D Laserscanning im Rahmen von Einschluss und Überwachung der Brennelementbehälter in den Zwischenlagern
- AP 6.2.2: Auswertung des Feldtests zur Eignung der Myonen-Tomographie zur Re-Verifikation von Brennelementbehältern in den Zwischenlagern
- AP 6.2.3: Durchführung eines Promotionsprojekts zur multitemporalen Satellitenbildanalyse im Rahmen der Safeguardsüberwachung von kerntechnischen Anlagen
- AP 6.2.4: Keine
- AP 6.3.1: Nachbereitung der Arbeitsgruppe für Nukleartechnologie und Nonproliferation (AG2N)
- AP 6.3.2: Keine
- AP 6.3.3: Mitarbeit in der Arbeitsgemeinschaft Kernmaterialüberwachung (AKÜ) sowie im Arbeitskreis Spaltstoffüberwachung des vgb energy e.V.
- AP 6.3.4: ESARDA: Leitung von zwei Arbeitsgruppen und Mitarbeit in weiteren Arbeitsgruppen; INMM: Leitung der 'International Safeguards Division'; INMM/ESARDA: Mitarbeit bei der Vorbereitung der zweiten gemeinsamen Jahrestagung, Wien, Mai 2023

4. Geplante Weiterarbeiten

- AP 6.1.1: Fortsetzung der o.g. Arbeiten
- AP 6.1.2: Beginn des o.g. Promotionsprojekts
- AP 6.1.3: Fortsetzung der o.g. Arbeiten
- AP 6.2.1: Keine
- AP 6.2.2: Fortsetzung der o.g. Arbeiten
- AP 6.2.3: Durchführung eines Fallbeispiels zum Monitoring von HAW-Endlagerstandorten
- AP 6.2.3: Keine
- AP 6.3.1: Vorbereitung eines neuen Arbeitsprogramms für die AG2N
- AP 6.3.2: Keine
- AP 6.3.3: Fortsetzung der o.g. Arbeiten
- AP 6.3.4: Fortsetzung der o.g. Arbeiten

5. Berichte, Veröffentlichungen

- A. Lorenzon et al., The MUTOMCA Project: Investigation of muon tomography for reverification purposes of spent fuel casks, Proc. Joint INMM/ESARDA Annual Meeting, Vienna, 22.-25. Mai 2023

Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer: RWTH Aachen		Förderkennzeichen: 02 W 6281
Vorhabensbezeichnung: Antineutrino-Detektion zur Überwachung radioaktiver Abfälle (NU-SAFEGUARDS)		
Zuordnung zum FuE-Programm: D3 Kernmaterialüberwachung (Safeguards), Felder D3.1 und D3.2		
Laufzeit des Vorhabens: 01.05.2022 bis 30.04.2025	Berichtszeitraum: 01.01.2023 bis 30.06.2023	
Gesamtkosten des Vorhabens: 344.338,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Malte Götsche	

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Es gibt bislang keine Techniken, um die hochradioaktiven Abfälle in Endlagern nach deren Einschluss direkt zu verifizieren. Bisherige Ansätze beruhen auf einem „black box“ Ansatz, bei dem unter Nutzung verschiedener „Containment and Surveillance“ Verfahren überprüft werden soll, dass kein Zugang zum Endlager geschaffen wird. Da einzelne Techniken jedoch ausfallen können, ist der Einsatz redundanter Verfahren notwendig. Entgegen der „black box“-Annahme gibt es durchaus Teilchen, die von den radioaktiven Abfällen emittiert werden und von Wirtsgesteinen nicht abgeschirmt werden: Antineutrinos. Diese entstehen aus Zerfallsprozessen in den Abfällen. Deren Detektion kann also Aufschluss über das Inventar geben. Auch zur Überwachung von Zwischenlagern könnte sich die Antineutrino-Detektion eignen. Wir werden mit diesem Vorhaben die erste detaillierte angewandte Studie zu Antineutrino-Monitoring als Fernüberwachungs-Tool von Endlagern durchführen. Zur Erhöhung der Redundanz von Safeguards-Maßnahmen soll dieser Ansatz darüber hinaus auch für die Überwachung von Zwischenlagern betrachtet werden. Das Ziel ist dabei, die prinzipielle Machbarkeit sowie konkrete Möglichkeiten und Grenzen entsprechender Detektionsverfahren zu erfassen.

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

- AP1: Untersuchung verschiedener Detektortypen
- AP2: Modellierung verschiedener Endlager- und Zwischenlagerkonfigurationen
- AP3: Abschätzungen der erwarteten Signal- und Untergrundraten
- AP4: Entwicklung konkreter Detektordesigns und Auswertemethoden
- AP5: Definition konkreter Einsatzszenarien für Safeguards und Sicherheit
- AP6: Einbettung von Antineutrino-Monitoring in Safeguards-Gesamtkonzept

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Die vorläufigen Ergebnisse aus AP2 in der letzten Berichtsperiode wurden im Rahmen eines IAEA Workshops Anfang 2023 in Wien präsentiert um die entwickelte Methodik und Software zu validieren, in Kombination mit weiterführenden Expertengesprächen. Daraufhin wurde ein repräsentatives Endlagermodell, basierend auf früheren Endlagerkonzepten für den Standort Gorleben, entwickelt.

Dieses Modell wurde dann genutzt, um die erwarteten Interaktionsraten für Modelldetektoren mit festen 80 m³ Volumen und verschiedenen Detektionsmedien zu ermitteln, inklusive der Abhängigkeit von Detektorentfernung zur Lagerstätte und der zeitlichen Entwicklung. Die zwei Schlüsselergebnisse waren: 1), dass alle betrachteten Technologien (Szintillatoren – flüssig, Plastik, undurchsichtig – und flüssig-organische Zeitprojektionskammern) Interaktionsraten in der gleichen Größenordnung aufweisen und somit von der Zählrate vergleichbar sind und 2), dass auch für größere Endlagerflächen und Mengen, der radioaktive Zerfall der Hauptantineutrino-Emitters (Sr-90) selbst bei den relativ großen Modelldetektoren nach ca. 250 Jahren unter eine Antineutrino-Interaktion pro Monat fällt und somit eine effektive Langzeitüberwachung von Kernmaterial mit Antineutrinos

unwahrscheinlich macht. Expertengespräche mit dem Lehrstuhl für Endlagersicherheit der RWTH Aachen haben diese Schlussfolgerung bestärkt, da eine Kompensation des Einbruchs der Zählraten durch einen geringen Detektorabstand sich als sicherheitstechnisch problematisch gestaltet (Mindestabstandszonen).

Entsprechend wurden daraufhin die Zwischenlager-Studien intensiviert, da die höhere Aktivität des Kernabfalls, die Lagerung an der Oberfläche und aktive Zugang zu den Einrichtungen den Einsatz eines Antineutrino-Detektors erheblich vereinfachen würde. Des Weiteren gibt es aktive Forschungsbemühungen, die Kernmaterialüberwachung an Zwischenlagern zu verbessern (z.B. via Myonentomographie) um Inspektionen und Strahlenbelastungen zu minimieren. Für diese Studie wurde ein Zwischenlagermodell entwickelt, das auf dem STEAG-Konzept basiert, das an verschiedenen deutschen Kernkraftstandorten umgesetzt wurde. Die vorherige Bestimmung der Interaktionsraten wurde wiederholt und durch eine statistische Analyse der Ergebnisse erweitert. Für konservative Detektorpositionen (10 m Abstand von der Außenwand des Zwischenlagers, Positionierung ohne Kenntnis der inneren Anordnung) kann eine Teilentnahme (50%) aus einem Behälter in durchschnittlich 10 Monaten mit 90% Konfidenz nachgewiesen werden. Nach der Vorstellung dieser Ergebnisse wurden weitere Gespräche mit FZ Jülich geführt, Studien durchgeführt und Recherchen betrieben. Diese Arbeiten werden noch weitergeführt, weisen aber darauf hin, dass weitere Optimierungen möglich sind unter Einbezug von Inventarinformationen und Messkriterien der IAEA, speziell für den Einsatz als Re-Verifikationsinstrument oder um Inspektionsintervalle zu verbessern.

Weitere Arbeit an AP3 die momentan durchgeführt werden, sind die Ermittlungen von Untergrundraten. Basierend auf Ergebnissen der Geoneutrino-Gemeinschaft wurden die Untergrundraten durch Geo- und Reaktorantineutrinos ermittelt und miteinbezogen. Für die Detektionsmedien wurde zudem die erwartete Radioaktivität durch Verunreinigungen geschätzt. Des Weiteren wird momentan die Untergrundrate durch kosmische Myonen und deren Aktivierungsprodukte in Detektionsmedien untersucht.

4. Geplante Weiterarbeiten

Sobald die Bestimmung der kosmischen Ereignisrate abgeschlossen ist, existieren fundierte Signal- und Untergrundraten für die untersuchten Konfigurationen. Die bisher genutzte statistische Analyse wird mit diesen Raten wiederholt, AP3 im Kern abgeschlossen wird.

Daraufhin wird AP4 beginnen und verbesserte, spezifischere Auswertemethoden werden untersucht, insbesondere vor dem Hintergrund der geplanten Einsatzzwecke (siehe oben, z.B. Re-Verifikation, Alarm für Inspektionen). Als Teil von AP4 werden auch die bislang genutzten generischen Detektorsimulation detaillierter gestaltet, mit zusätzlichen Informationen zur Auslesemethodik und der Entwicklung von Rekonstruktionsalgorithmen. Diese erhöhte Genauigkeit wird genutzt, um 1) spezifische Besonderheiten der untersuchten Detektionsmethoden zu verstehen (z.B. Richtungsauflösung oder Teilchenidentifikation) und 2) die jeweilige Effizienz der Untergrund-Unterdrückung zu bestimmen.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Vorträge:

Y. Schnellbach, "Update on Antineutrino-based Safeguards Approaches for Spent Nuclear Fuel". Vortrag am Technical Meeting on Nuclear Data Needs for Antineutrino Spectra Applications (17.01.2023).

Y. Schnellbach, "Anti-neutrino detector concepts for safeguarding spent nuclear fuel repositories". Vortrag an der 86. Jahrestagung der DPG (22.03.2023).

N. Herrman, "Prototype studies of a liquid organic TPC for the detection of low energy antineutrinos". Vortrag an der 86. Jahrestagung der DPG (23.03.2023).

T. Radermacher, "Detection of Low-Energy Antineutrinos with Liquid-organic Time Projection Chambers". Vortrag an der 86. Jahrestagung der DPG (24.05.2023).

Y. Schnellbach, "Antineutrino Detector Concepts for Safeguarding Spent Nuclear Fuel Repositories". Vortrag am INMM & ESARDA Joint Annual Meeting (22.03.2023).

Berichte & Studienarbeiten:

Marika Ellerbroek, "Source studies of a liquid organic TPC prototype using a simulation".
Bachelorarbeit RWTH Aachen (15.02.2023).

Veröffentlichungen:

T. Radermacher *et al.*, "Liquid-organic time projection chamber for detecting low energy antineutrinos". Nucl. Instr. Meth. A, Vol. 1054, 168426, Elsevier (2023).

Y. Schnellbach *et al.*, "Antineutrino Detector Concepts for Safeguarding Spent Nuclear Fuel Repositories". INMM & ESARDA Joint Annual Meeting Proceedings 2023, INMM (2023).

Information zu Publikationen sowie zu Aus- und Weiterbildung

In den Halbjahresberichten werden in kurzgefasster Form die Ergebnisse der aktuell bewilligten Forschungsvorhaben dargestellt. Vorhabenrelevante Publikationen werden aufgelistet, soweit es der Platz zulässt; es ist aber nicht immer möglich, alle im Rahmen eines FuE-Vorhabens erfolgten Veröffentlichungen (schriftlich oder mündlich) aufzunehmen. Ferner sind Informationen zur Aus- und Weiterbildung wissenschaftlichen Nachwuchses bei den Forschungseinrichtungen nicht explizit abgefragt und ausgewiesen worden.

Es wurde daher beginnend mit dem Jahr 2015 vereinbart, zukünftig Angaben zur Gesamtzahl der Publikationen und zu Ausbildungsaspekten zu machen. Die entsprechenden Daten werden von den Forschungseinrichtungen zur Verfügung gestellt.

Die zusammenfassende Darstellung erfolgt im jeweils zweiten Halbjahresbericht eines Kalenderjahres. Damit soll zusätzlich zur Kurzdarstellung der Vorhabenergebnisse in den Fortschrittsberichten dokumentiert werden, dass und wie die FuE-Ergebnisse verbreitet werden.

Publikationen

Im Jahr 2022 erfolgten in rund 90 Veröffentlichungen in begutachteten Journalen, in Form von Schlussberichten, Doktor-, Master-, Bachelor- und Studienarbeiten oder in sonstiger schriftlicher Form die Publikation von Ergebnissen von FuE-Vorhaben durch die geförderten Forschungseinrichtungen.

Zudem wurden im Jahr 2022 rund 122 Vorträge auf Konferenzen, bei Workshops und sonstigen Veranstaltungen gehalten und Ergebnisse bzw. Zwischenergebnisse präsentiert.

Aus- und Weiterbildung

Ein strategisches Forschungsziel der BMUV-Förderung ist die Bereitstellung von Expertise und Wissen, der Erhalt und Ausbau wissenschaftlich-technischer Kompetenz und als wichtiges Element dafür die Unterstützung und Förderung des wissenschaftlichen Nachwuchses.

Die Aus- und Weiterbildung von Post-Docs, Doktoranden, Masterstudenten erfolgt nahezu ausschließlich durch Universitäten und Einrichtungen der Helmholtz Gemeinschaft. Gleichwohl erfolgt in einzelnen Fällen die Ausbildung und Finanzierung wissenschaftlichen Nachwuchses im Rahmen einer wissenschaftlichen Kooperation zwischen Universitäten und Unternehmen.

Im Jahr 2022 waren in den hier aufgeführten FuE-Vorhaben 57 Nachwuchswissenschaftlerinnen und Nachwuchswissenschaftler in FuE-Vorhaben eingebunden.

3 Verzeichnis der Forschungsstellen

BGE TECHNOLOGY GmbH, Eschenstraße 55, 31224 Peine

- | | | |
|--------------------|---|-------|
| 02 E 11577A | Verbundprojekt: Sicherheitsanalytische Untersuchungen zu Endlagersystemen im Kristallin (SUSE), Teilprojekt A | 📖 20 |
| 02 E 11839 | Entwicklung eines Leitfadens zur Auslegung und zum Nachweis von geotechnischen Barrieren für ein HAW Endlager in Salzformationen (RANGERS) | 📖 40 |
| 02 E 11890A | Verbundprojekt: Entwicklung und Test eines erweiterten Hoek-Brown Stoffmodells zur Berücksichtigung anisotropen Festigkeitsverhaltens bei der Anwendung der Integritätskriterien für kristalline Wirtsgesteine (BARIK), Teilprojekt A | 📖 74 |
| 02 E 11900 | Langzeitsicherheit von Verschlussystemen in Schächten und Rampen im Vergleich (LARYSSA) | 📖 78 |
| 02 E 11951B | Verbundprojekt: Kompaktion von Salzgrus für den sicheren Einschluss - Phase 2 (KOMPASS II), Teilprojekt B | 📖 94 |
| 02 E 11971B | Verbundprojekt: Anwendbarkeit von Niedertemperatur-Salzschmelzen für Verschlussmaßnahmen von Endlagern für radioaktiver Abfälle im Wirtsgestein Salz (SalVE), Teilprojekt B | 📖 105 |
| 02 E 12042A | Verbundprojekt: Erarbeitung einer Methodik zur systematischen Ableitung von zu erwartenden und abweichenden Entwicklungen im Kristallingestein in Deutschland und exemplarische Anwendung als Grundlage zur Bewertung des sicheren Einschlusses unter Berücksichtigung von Optimierungsmaßnahmen (CHRISTA III), Teilpr. A | 📖 129 |

Christian-Albrechts-Universität zu Kiel, Christian-Albrecht-Platz 4, 24118 Kiel


- | | | |
|--------------------|--|-------|
| 02 E 11849B | Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt B | 📖 170 |
|--------------------|--|-------|

Dr. Andreas Hampel, Grünberger Str. 56, 55129 Mainz



Forschungszentrum Jülich GmbH, Wilhelm-Johnen-Straße, 52428 Jülich

- | | | |
|--------------------|---|-------|
| 02 E 11921A | Verbundprojekt: Untersuchungen zur SEParation von AMericiuM aus hochradioaktiven Abfalllösungen (SEPAM), Teilprojekt A | 📖 84 |
| 02 W 6279 | Neu- und Weiterentwicklung von Konzepten, Methoden und Techniken für die internationale Kernmaterialüberwachung, insbesondere im Rahmen der nuklearen Entsorgung (SAFEGUARDS-3) | 📖 193 |










Freie Universität Berlin, Kaiserwerther Str. 16-18, 14195 Berlin












- 02 E 11849C** Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt C  173

Friedrich-Schiller-Universität Jena, Fürstengraben 1, 07743 Jena



- 02 E 11911B** Verbundprojekt: Vorhersage der heterogenen Radionuklidsorption auf Kluft- und Störungsflächen in granitischen Gesteinen: Parametrisierung und Validierung verbesserter reaktiver Transportmodelle (WTZ-Granit), Teilprojekt B  82
- 02 E 12153A** Verbundprojekt: Erosion von Bentonit unter In-situ Bedingungen durch Einwirkung natürlicher Wässer in geologischen Tiefenlagern (EVIDENT), Teilprojekt A  163





Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Schwertnergasse 1, 50667 Köln

- 02 E 11466** Entwicklung von Rechenmodulen für die integrierte Modellierung von Transportprozessen im einschlusswirksamen Gebirgsbereich (RepoTREND+)  17
- 02 E 11577B** Verbundprojekt: Sicherheitsanalytische Untersuchungen zu Endlagersystemen im Kristallin (SUSE), Teilprojekt B  22
- 02 E 11627** Arteigene Versatz- und Verschlussmaterialien für die Endlagerung hochradioaktiver Abfälle in Tonformationen (AVET)  24
- 02 E 11668A** Verbundprojekt: Smart-K_d in der Langzeitsicherheitsanalyse - Anwendungen (SMILE), Teilprojekt A  26
- 02 E 11698** Untersuchung thermisch-hydraulisch-mechanisch-chemischer Einwirkungen auf zementbasierte Dichtelemente (THYMECZ)  28
- 02 E 11799B** Verbundprojekt: Vertikales hydraulisches Dichtsystem nach dem Sandwich-Prinzip - Hauptprojekt (SANDWICH-HP), Teilprojekt B  32
- 02 E 11819** Mineralumwandlung und Sorption bei erhöhten Temperaturen in geklüfteten Kristallingesteinen und Barrierematerial (MUSE)  36
- 02 E 11829** Tonsteinforschung im Felslabor Mont Terri ab Phase 25 (MonTe-25)  38
- 02 E 11870A** Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt A  60


02 E 11880	Sicherheitsrelevante Untersuchungen zur Bentonitaufsättigung (SIRUB)	 72
02 E 11941	Wissenschaftliche Grundlagen zum Nachweis der Langzeitsicherheit von Endlagern (WiGru-9)	 90
02 E 11951A	Verbundprojekt: Kompaktion von Salzgrus für den sicheren Einschluss - Phase 2 (KOMPASS II), Teilprojekt A	 92
02 E 11981A	Verbundprojekt: Implementierung eines Monitoringsystems zur Evaluierung der Korrosionsvorgänge an Behältermaterialien in Bentonit-basierten Endlagerkonzepten (IMKORB), Teilprojekt A	 107
02 E 12012A	Verbundprojekt: Weiterentwicklung von d ^{3f++} : Hydrogeologische Modellierung im regionalen Maßstab (HYMNE II), Teilprojekt A	 119
02 E 12022B	Verbundprojekt: Internationales Benchmarking zur Verifizierung und Validierung von TH ² M-Simulatoren insbesondere im Hinblick auf fluiddynamische Prozesse in Endlagersystemen - Erweiterung auf multiphysikalische Ansätze und mehrdimensionale Modellgeometrien (BenVaSim II), Teilprojekt B	 125
02 E 12032	Methoden zur experimentellen und numerischen Analyse der geologischen Barriere eines Endlagers in tonreichen Sedimentgesteinsformationen (MAGNUS)	 127
02 E 12042B	Verbundprojekt: Erarbeitung einer Methodik zur systematischen Ableitung von zu erwartenden und abweichenden Entwicklungen im Kristallingestein in Deutschland und exemplarische Anwendung als Grundlage zur Bewertung des sicheren Einschlusses unter Berücksichtigung von Optimierungsmaßnahmen (CHRISTA III), Teilpr. B	 131
02 E 12052B	Verbundprojekt: Konkurrenz und Reversibilität bei Sorptionsvorgängen (KuRSiv), Teilprojekt B	 135
02 E 12122A	Verbundprojekt: Stabilität von Mineralphasen des Eisens im Nahfeld eines Endlagers (STAMINA), Teilprojekt A	 159
02 E 12153C	Verbundprojekt: Erosion von Bentonit unter In-situ Bedingungen durch Einwirkung natürlicher Wässer in geologischen Tiefenlagern (EVIDENT), Teilprojekt C	 165

Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e.V., Bautzner Landstraße 400, 01328 Dresden

02 E 11860B	Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt B	 44
02 E 11870B	Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt B	 62

- 02 E 11911A** Verbundprojekt: Vorhersage der heterogenen Radionuklid sorption auf Kluft- und Störungsflächen in granitischen Gesteinen: Parametrisierung und Validierung verbesserter reaktiver Transportmodelle (WTZ-Granit), Teilprojekt A  80
- 02 E 12052A** Verbundprojekt: Konkurrenz und Reversibilität bei Sorptionsvorgängen (KuRSiv), Teilprojekt A  133
- 02 E 12072B** Verbundprojekt: MgO-Beton C3 als langzeitbeständiges und schnellwirksames Verschlusselement für Schachtverschlüsse zukünftiger HAW-Endlager im Salinar (MgO-C3), Teilprojekt B  147
- 02 E 12112A** Verbundprojekt: Systematic sensitivity analysis for mechanistic geochemical models using field data from crystalline rock (SANGUR), Teilprojekt A  155


Helmholtz-Zentrum Potsdam Deutsches GeoForschungsZentrum GFZ, Telegrafenberg, 14473 Potsdam

- 02 E 12062B** Verbundprojekt: Spannungsprognosen – Quantifizierung und Reduzierung von Ungewissheiten mit geomechanisch-numerischen Untergrundmodellen (SQuaRe), Teilprojekt B: Bayesischer Ansatz zur Kalibrierung geomechanisch-numerischer Modelle mit Reduzierung von Ungewissheiten  141


IfG Institut für Gebirgsmechanik GmbH, Friederikenstr. 60, 04279 Leipzig

- 02 E 11951C** Verbundprojekt: Kompaktion von Salzgrus für den sicheren Einschluss - Phase 2 (KOMPASS II), Teilprojekt C  97



Johannes Gutenberg-Universität Mainz, Saarstraße 21, 55122 Mainz




- 02 E 11860A** Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt A  42

Johann Wolfgang Goethe-Universität Frankfurt am Main, Senckenberganlage 31, 60325 Frankfurt am Main






- 02 E 12012B** Verbundprojekt: Weiterentwicklung von d^{3f++}: Hydrogeologische Modellierung im regionalen Maßstab (HYMNE II), Teilprojekt B  121

Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Kaiserstr. 12, 76131 Karlsruhe


- 02 E 11799A** Verbundprojekt: Vertikales hydraulisches Dichtsystem nach dem Sandwich-Prinzip - Hauptprojekt (SANDWICH-HP), Teilprojekt A  30
- 02 E 12001A** Verbundprojekt: Sandwich Support Projekt 1: Heterogene Bentonithydratation (SANDWICH-SP1), Teilprojekt A  115

- 02 E 12052C** Verbundprojekt: Konkurrenz und Reversibilität bei Sorptionsvorgängen (KuRSiv), Teilprojekt C  137
- 02 E 12122B** Verbundprojekt: Stabilität von Mineralphasen des Eisens im Nahfeld eines Endlagers (STAMINA), Teilprojekt B  161
- 02 E 12153B** Verbundprojekt: Erosion von Bentonit unter In-situ Bedingungen durch Einwirkung natürlicher Wässer in geologischen Tiefenlagern (EVIDENT), Teilprojekt B  164




Leibniz Universität Hannover, Welfengarten 1, 30167 Hannover

- 02 E 11849F** Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt F  180
- 02 E 11870E** Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt E  68
- 02 E 11870F** Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt F  70
- 02 E 11981C** Verbundprojekt: Implementierung eines Monitoringsystems zur Evaluierung der Korrosionsvorgänge an Behältermaterialien in Bentonit-basierten Endlagerkonzepten (IMKORB), Teilprojekt C  111
- 02 E 12092** Recherche und Beschreibung für das Endlagerbehältersystem in Frage kommende Materialien (ElaBeMa)  149

Öko-Institut. Institut für angewandte Ökologie e. V., Merzhauser Str. 173, 79100 Freiburg

- 02 E 11849G** Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt G  183


Rheinisch-Westfälische Technische Hochschule Aachen, Templergraben 55, 52062 Aachen


- 02 E 11931** Einfluss der thermischen Reife auf die gekoppelten hydro-mechanischen Eigenschaften niedrig-durchlässiger Tonsteine – Feld & Laborskala (Maturity)  88
- 02 E 12062C** Verbundprojekt: Spannungsprognosen – Quantifizierung und Reduzierung von Ungewissheiten mit geomechanisch-numerischen Untergrundmodellen (SQuaRe), Teilprojekt C: Ungewissheiten durch geometrische Parameter, Erstellung von Ersatzmodellen durch Methoden der künstlichen Intelligenz  143
- 02 W 6281** Antineutrino-Detektion zur Überwachung radioaktiver Abfälle (NU-SAFEGUARDS)  195


Ruhr-Universität Bochum, Universitätsstr. 150, 44801 Bochum


02 E 12001B Verbundprojekt: Sandwich Support Projekt 1: Heterogene Bentonithydratation (SANDWICH-SP1), Teilprojekt B  117


Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Hermann-von-Helmholtz-Platz 1, 76344 Eggenstein-Leopoldshafen

02 E 11849D Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt D  175


02 E 11849E Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt E  177


02 E 11860C Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt C  46

02 E 11921B Verbundprojekt: Untersuchungen zur SEParation von AMericiuM aus hochradioaktiven Abfalllösungen (SEPAM), Teilprojekt B  86


02 E 11981B Verbundprojekt: Implementierung eines Monitoringsystems zur Evaluierung der Korrosionsvorgänge an Behältermaterialien in Bentonit-basierten Endlagerkonzepten (IMKORB), Teilprojekt B  109


Technische Universität Bergakademie Freiberg, Akademiestraße 6, 09599 Freiberg

02 E 11799C Verbundprojekt: Vertikales hydraulisches Dichtsystem nach dem Sandwich-Prinzip - Hauptprojekt (SANDWICH-HP), Teilprojekt C  34


02 E 11890B Verbundprojekt: Entwicklung und Test eines erweiterten Hoek-Brown Stoffmodells zur Berücksichtigung anisotropen Festigkeitsverhaltens bei der Anwendung der Integritätskriterien für kristalline Wirtsgesteine (BARIK), Teilprojekt B  76

02 E 11961 Entwicklung eines salzgrusbasierten Versatzkonzepts unter der Option Rückholbarkeit - Phase 1 (SAVER)  101



02 E 11971A Verbundprojekt: Anwendbarkeit von Niedertemperatur-Salzschmelzen für Verschlussmaßnahmen von Endlagern für radioaktiver Abfälle im Wirtsgestein Salz (SaIve), Teilprojekt A  103

02 E 12072A Verbundprojekt: MgO-Beton C3 als langzeitbeständiges und schnellwirksames Verschlusselement für Schachtverschlüsse zukünftiger HAW-Endlager im Salinar (MgO-C3), Teilprojekt A  145







Technische Universität Berlin, Straße des 17. Juni 135, 10623 Berlin

- 02 E 11849H** Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt H  185


Technische Universität Carolo-Wilhelmina zu Braunschweig, Pockelsstr. 14, 38106 Braunschweig

- 02 E 11849I** Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt I  188
- 02 E 12102** Entwicklung einer selbstlernenden Modellierungsmethodik zu geomechanischen und geotechnischen Prozessen am Beispiel der Planungs- und Auffahrungsphase einer Einlagerungsstrecke eines Tiefenlagers (SEMOTI)  153


Technische Universität Clausthal, Adolph-Römer-Straße 2A, 38678 Clausthal-Zellerfeld

- 02 E 11849A** Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt A  167
- 02 E 11951D** Verbundprojekt: Kompaktion von Salzgrus für den sicheren Einschluss - Phase 2 (KOMPASS II), Teilprojekt D  99
- 02 E 11991** Entwicklung und Validation einer neuartigen Versuchstechnik für triaxiale Kriechversuche bei geringer deviatorischer Belastung (KRIECHTECH)  113
- 02 E 12022A** Verbundprojekt: Internationales Benchmarking zur Verifizierung und Validierung von TH²M-Simulatoren insbesondere im Hinblick auf fluiddynamische Prozesse in Endlagersystemen - Erweiterung auf multiphysikalische Ansätze und mehrdimensionale Modellgeometrien (BenVaSim II), Teilprojekt A  123
- 02 E 12082** Langzeitsicheres Abdichtungselement aus Salzschnittblöcken - Durchführung, Auswertung und Reanalyse von THM-Versuchen unter triaxialer Extensionsbeanspruchung (SSBVIER)  151
- 02 E 12112B** Verbundprojekt: Systematic sensitivity analysis for mechanistic geochemical models using field data from crystalline rock (SANGUR), Teilprojekt B  157



Technische Universität Darmstadt, Karolinenplatz 5, 64289 Darmstadt

- 02 E 12062A** Verbundprojekt: Spannungsprognosen – Quantifizierung und Reduzierung von Ungewissheiten mit geomechanisch-numerischen Untergrundmodellen (SQuaRe), Teilprojekt A: Ungewissheiten durch Materialparameter, Diskretisierung, Initial- und Randbedingungen  139


Technische Universität Dresden, Helmholtzstr. 10, 01069 Dresden

- 02 E 11860G** Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt G  55


Technische Universität München, Arcisstraße 21, 80333 München

- 02 E 11860E** Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt E  51
- 02 E 11870D** Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt D  66


Universität des Saarlandes, Campus, 66123 Saarland

- 02 E 11860D** Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt D  48


Universität Greifswald, Domstr. 11, 17489 Greifswald

- 02 E 11870C** Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt C  64


Universität Heidelberg, Grabengasse 1, 69117 Heidelberg

- 02 E 11860H** Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt H  58

Universität Kassel, Mönchebergstr. 19, 34125 Kassel

- 02 E 11849J** Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt J  190

Universität Potsdam, Am Neuen Palais 10, 14469 Potsdam

- 02 E 11860F** Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt F  53