

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

**PTE Nr. 63**

BMUV geförderte FuE-Vorhaben zur  
„Endlagerung radioaktiver Abfälle“

Berichtszeitraum: 1. Januar - 30. Juni 2022

Projektträger Karlsruhe (PTKA)  
Entsorgung

**Oktober 2022**

## PTE-Berichte

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

Die Fortschrittsberichtsreihen behandeln folgende Themenschwerpunkte:

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

Die Fortschrittsberichtsreihen sind online verfügbar:

[www.ptka.kit.edu/ptka-alt/wte/287.php](http://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)<sup>1</sup> arbeitet das KIT seit 1991 als Projektträger auf dem Gebiet der „nuklearen Entsorgung“.

Im Rahmen dieses Auftrages betreut der Projektträger Karlsruhe fachlich und administrativ die vom BMWi geförderten FuE-Vorhaben zur Endlagerung radioaktiver Abfälle. Seit Januar 2021 ist das Projektförderprogramm „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 BMWi betreut werden.

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

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

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

Der Bericht ist wie folgt gegliedert:

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

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

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

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

---

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



# Inhaltsverzeichnis




<b>1</b>	<b>Verzeichnis der Vorhaben gemäß FuE-Bereiche.....</b>	<b>1</b>
C	Forschungsgebiet Endlagerung .....	1
C1	Standortauswahl .....	1
C2	Sicherheits- und Endlagerkonzepte; Endlagertechnik und (geo-)technische Barrieren .....	3
C3	Sicherheitsnachweis .....	7
D	Querschnittsaufgaben .....	11
D1	Wissens- und Kompetenzmanagement .....	11
D2	Sozio-technische Fragestellungen .....	13
D3	Kernmaterialüberwachung (Safeguards).....	15
<b>2</b>	<b>Formalisierte Zwischenberichte .....</b>	<b>17</b>
2.2	VORHABEN BEREICH C .....	17
2.3	VORHABEN BEREICH D .....	177
	Information zu Publikationen sowie zu Aus- und Weiterbildung.....	203
<b>3</b>	<b>Verzeichnis der Forschungsstellen .....</b>	<b>205</b>



# 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)	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln</b>	 86
02 E 11931	Einfluss der thermischen Reife auf die gekoppelten hydro-mechanischen Eigenschaften niedrig-durchlässiger Tonsteine – Feld & Laborskala (Maturity)	<b>Rheinisch-Westfälische Technische Hochschule Aachen</b>	 146
02 E 11991	Entwicklung und Validation einer neuartigen Versuchstechnik für triaxiale Kriechversuche bei geringer deviatorischer Belastung (KRIECHTECH)	<b>TU Clausthal, Clausthal-Zellerfeld</b>	 170





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

- |                    |   |  |      |
|--------------------|---|--|------|
| <b>02 E 11577A</b> | Verbundprojekt: Sicherheitsanalytische Untersuchungen zu Endlagersystemen im Kristallin (SUSE), Teilprojekt A   | <b>BGE Technology GmbH, Peine</b>  | 📖 30 |
| <b>02 E 11577B</b> | Verbundprojekt: Sicherheitsanalytische Untersuchungen zu Endlagersystemen im Kristallin (SUSE), Teilprojekt B   | <b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln</b>                                     | 📖 32 |
| <b>02 E 11627</b>  | Arteigene Versatz- und Verschlussmaterialien für die Endlagerung hochradioaktiver Abfälle in Tonformationen (AVET)  | <b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln</b>                                     | 📖 42 |
| <b>02 E 11688</b>  | Langzeitsicheres Abdichtungselement aus Salzschnittblöcken - Durchführung, Auswertung und Reanalyse von THM-Versuchen (Salzschnittblöcke III)   | <b>TU Clausthal, Clausthal-Zellerfeld</b>  | 📖 54 |
| <b>02 E 11698</b>  | Untersuchung thermisch-hydraulisch-mechanisch-chemischer Einwirkungen auf zementbasierte Dichtelemente (THYMECZ)  | <b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln</b>                                     | 📖 56 |
| <b>02 E 11748A</b> | Verbundprojekt: Strömungstechnischer Funktionsnachweis für Verschlussbauwerke und flüssigkeitsgestützte Abdichtung des Kontaktbereiches - Phase III: Vertiefung Kenntnisstand Kontaktbereich & Injektionsmittel, In-situ-Versuche (STROEFUN III), Teilprojekt A | <b>TU Clausthal, Clausthal-Zellerfeld</b>  | 📖 58 |
| <b>02 E 11748B</b> | Verbundprojekt: Strömungstechnischer Funktionsnachweis für Verschlussbauwerke und flüssigkeitsgestützte Abdichtung des Kontaktbereiches - Phase III: Vertiefung Kenntnisstand Kontaktbereich & Injektionsmittel, In-situ-Versuche (STROEFUN III), Teilprojekt B | <b>Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e. V., Dresden</b>   | 📖 60 |
| <b>02 E 11759A</b> | Verbundprojekt: Grimsel Felslabor: In-situ-Experimente zur Bentonit Langzeit-Stabilität und der Radionuklidmobilität an der Grenzfläche Bentonit - Kristallin (KOLLORADO-e3), Teilprojekt A   | <b>Friedrich-Schiller-Universität Jena</b>   | 📖 62 |
| <b>02 E 11759B</b> | Verbundprojekt: Grimsel Felslabor: In-situ-Experimente zur Bentonit Langzeit-Stabilität und der Radionuklidmobilität an der Grenzfläche Bentonit - Kristallin (KOLLORADO-e3), Teilprojekt B   | <b>Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Eggenstein-Leopoldshafen</b> | 📖 64 |













02 E 11759C	Verbundprojekt: Grimsel Felslabor: In-situ-Experimente zur Bentonit Langzeit-Stabilität und der Radionuklidmobilität an der Grenzfläche Bentonit - Kristallin (KOLLORADO-e3), Teilprojekt C	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln</b>	📖 66
02 E 11769A	Verbundprojekt: MgO-Spritzbeton für Streckenverschlüsse für HAW-Endlager im Steinsalz (MgO-S3), Teilprojekt A	<b>Technische Universität Bergakademie Freiberg</b>	📖 68
02 E 11769B	Verbundprojekt: MgO-Spritzbeton für Streckenverschlüsse für HAW-Endlager im Steinsalz (MgO-S3), Teilprojekt B	<b>Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e. V., Dresden</b>	📖 70
02 E 11779	MgO-Spritzbeton für Streckenverschlüsse für HAW-Endlager im Steinsalz, Qualitätssicherung mit Ultraschall (MgO-S3)	<b>Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung (BAM), Berlin</b>	📖 72
02 E 11799A	Verbundprojekt: Vertikales hydraulisches Dichtsystem nach dem Sandwich-Prinzip - Hauptprojekt (SANDWICH-HP), Teilprojekt A	<b>Karlsruher Institut für Technologie (KIT)</b>	📖 74
02 E 11799B	Verbundprojekt: Vertikales hydraulisches Dichtsystem nach dem Sandwich-Prinzip - Hauptprojekt (SANDWICH-HP), Teilprojekt B	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln</b>	📖 76
02 E 11799C	Verbundprojekt: Vertikales hydraulisches Dichtsystem nach dem Sandwich-Prinzip - Hauptprojekt (SANDWICH-HP), Teilprojekt C	<b>Technische Universität Bergakademie Freiberg</b>	📖 78
02 E 11819	Mineralumwandlung und Sorption bei erhöhten Temperaturen in geklüfteten Kristallingesteinen und Barrierematerial (MUSE)	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln</b>	📖 84
02 E 11839	Entwicklung eines Leitfadens zur Auslegung und zum Nachweis von geotechnischen Barrieren für ein HAW Endlager in Salzformationen (RANGERS)	<b>BGE Technology GmbH, Peine</b>	📖 88
02 E 11870A	Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt A	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln</b>	📖 118
02 E 11870B	Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt B	<b>Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e. V., Dresden</b>	📖 120
02 E 11870C	Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt C	<b>Universität Greifswald</b>	📖 122
02 E 11870D	Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt D	<b>TU München</b>	📖 124
02 E 11870E	Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt E	<b>Leibniz Universität Hannover</b>	📖 126
02 E 11870F	Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt F	<b>Leibniz Universität Hannover</b>	📖 128

02 E 11880	Sicherheitsrelevante Untersuchungen zur Bentonitauflösung (SIRUB)	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln</b>	130
02 E 11900	Langzeitsicherheit von Verschlussystemen in Schächten und Rampen im Vergleich (LARYSSA)	<b>BGE Technology GmbH, Peine</b>	136
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	<b>Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e. V., Dresden</b>	138
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	<b>Friedrich-Schiller-Universität Jena</b>	140
02 E 11921A	Verbundprojekt: Untersuchungen zur SEPARation von AMericiem aus hochradioaktiven Abfalllösungen (SEPAM), Teilprojekt A	<b>Forschungszentrum Jülich GmbH</b>	142
02 E 11921B	Verbundprojekt: Untersuchungen zur SEPARation von AMericiem aus hochradioaktiven Abfalllösungen (SEPAM), Teilprojekt B	<b>Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Eggenstein-Leopoldshafen</b>	144
02 E 11951A	Verbundprojekt: Kompaktion von Salzgrus für den sicheren Einschluss - Phase 2 (KOMPASS II), Teilprojekt A	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln</b>	150
02 E 11951B	Verbundprojekt: Kompaktion von Salzgrus für den sicheren Einschluss - Phase 2 (KOMPASS II), Teilprojekt B	<b>BGE Technology GmbH, Peine</b>	152
02 E 11951C	Verbundprojekt: Kompaktion von Salzgrus für den sicheren Einschluss - Phase 2 (KOMPASS II), Teilprojekt C	<b>IfG Institut für Gebirgsmechanik GmbH, Leipzig</b>	154
02 E 11951D	Verbundprojekt: Kompaktion von Salzgrus für den sicheren Einschluss - Phase 2 (KOMPASS II), Teilprojekt D	<b>TU Clausthal, Clausthal-Zellerfeld</b>	156
02 E 11961	Entwicklung eines salzgrusbasierten Versatzkonzepts unter der Option Rückholbarkeit - Phase 1 (SAVER)	<b>Technische Universität Bergakademie Freiberg</b>	158
02 E 11971A	Verbundprojekt: Anwendbarkeit von Niedertemperatur-Salzschnmelzen für Verschlussmaßnahmen von Endlagern für radioaktiver Abfälle im Wirtsgestein Salz (SalVE), Teilprojekt A	<b>Technische Universität Bergakademie Freiberg</b>	160
02 E 11971B	Verbundprojekt: Anwendbarkeit von Niedertemperatur-Salzschnmelzen für Verschlussmaßnahmen von Endlagern für radioaktiver Abfälle im Wirtsgestein Salz (SalVE), Teilprojekt B	<b>BGE Technology GmbH, Peine</b>	162

- |                    |  |  |       |
|--------------------|--|--|-------|
| <b>02 E 11981A</b> | Verbundprojekt: Implementierung eines Monitoring-systems zur Evaluierung der Korrosionsvorgänge an Behältermaterialien in Bentonit-basierten Endlagerkonzepten (IMKORB), Teilprojekt A | <b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln</b>                                     | 📖 164 |
| <b>02 E 11981B</b> | Verbundprojekt: Implementierung eines Monitoring-systems zur Evaluierung der Korrosionsvorgänge an Behältermaterialien in Bentonit-basierten Endlagerkonzepten (IMKORB), Teilprojekt B | <b>Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Eggenstein-Leopoldshafen</b> | 📖 166 |
| <b>02 E 11981C</b> | Verbundprojekt: Implementierung eines Monitoring-systems zur Evaluierung der Korrosionsvorgänge an Behältermaterialien in Bentonit-basierten Endlagerkonzepten (IMKORB), Teilprojekt C | <b>Leibniz Universität Hannover</b>  | 📖 168 |
| <b>02 E 12001A</b> | Verbundprojekt: Sandwich Support Projekt 1: Heterogene Bentonithydratation (SANDWICH-SP1), Teilprojekt A   | <b>Karlsruher Institut für Technologie (KIT)</b>   | 📖 172 |
| <b>02 E 12001B</b> | Verbundprojekt: Sandwich Support Projekt 1: Heterogene Bentonithydratation (SANDWICH-SP1), Teilprojekt B   | <b>Ruhr-Universität Bochum</b>   | 📖 174 |

### C3 Sicherheitsnachweis

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

<b>02 E 11658A</b>	Verbundprojekt: Aktualisierung der Sicherheits- und Nachweismethodik für die HAW-Endlagerung im Tongestein in Deutschland (ANSICHT II), Teilprojekt A	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln</b>	 44
<b>02 E 11658B</b>	Verbundprojekt: Aktualisierung der Sicherheits- und Nachweismethodik für die HAW-Endlagerung im Tongestein in Deutschland (ANSICHT II), Teilprojekt B	<b>BGE Technology GmbH, Peine</b>	 46
<b>02 E 11668A</b>	Verbundprojekt: Smart-K <sub>d</sub> in der Langzeitsicherheitsanalyse - Anwendungen (SMILE), Teilprojekt A	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln</b>	 48
<b>02 E 11668B</b>	Verbundprojekt: Smart-K <sub>d</sub> in der Langzeitsicherheitsanalyse - Anwendungen (SMILE), Teilprojekt B	<b>Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e. V.</b>	 50
<b>02 E 11668C</b>	Verbundprojekt: Smart-K <sub>d</sub> in der Langzeitsicherheitsanalyse - Anwendungen (SMILE), Teilprojekt C	<b>Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Eggenstein-Leopoldshafen</b>	 52
<b>02 E 11809A</b>	Verbundprojekt: Weiterentwicklung von d <sup>3f++</sup> : Hydrogeologische Modellierung im regionalen Maßstab (HYMNE), Teilprojekt A	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln</b>	 80
<b>02 E 11809B</b>	Verbundprojekt: Weiterentwicklung von d <sup>3f++</sup> : Hydrogeologische Modellierung im regionalen Maßstab (HYMNE), Teilprojekt B	<b>Johann Wolfgang Goethe-Universität Frankfurt am Main</b>	 82
<b>02 E 11850A</b>	Verbundprojekt: Deutsch-chinesische Entsorgungsforschung – Pilotprojekt: Reanalysis of BRIUG THM Mock-up Test (ELF-China-Pilot), Teilprojekt A	<b>Helmholtz-Zentrum für Umweltforschung GmbH – UFZ -, Leipzig</b>	 90
<b>02 E 11850B</b>	Verbundprojekt: Deutsch-chinesische Entsorgungsforschung – Pilotprojekt: Reanalysis of BRIUG THM Mock-up Test (ELF-China-Pilot), Teilprojekt B	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln</b>	 92
<b>02 E 11850C</b>	Verbundprojekt: Deutsch-chinesische Entsorgungsforschung – Pilotprojekt: Reanalysis of BRIUG THM Mock-up Test (ELF-China-Pilot), Teilprojekt C	<b>Technische Universität Bergakademie Freiberg</b>	 94
<b>02 E 11850D</b>	Verbundprojekt: Deutsch-chinesische Entsorgungsforschung – Pilotprojekt: Reanalysis of BRIUG THM Mock-up Test (ELF-China-Pilot), Teilprojekt D	<b>TU Clausthal, Clausthal-Zellerfeld</b>	 96
<b>02 E 11850E</b>	Verbundprojekt: Deutsch-chinesische Entsorgungsforschung – Pilotprojekt: Reanalysis of BRIUG THM Mock-up Test (ELF-China-Pilot), Teilprojekt E	<b>Friedrich-Schiller Universität Jena</b>	 98

<b>02 E 11850F</b>	Verbundprojekt: Deutsch-chinesische Entsorgungsforschung – Pilotprojekt: Reanalysis of BRIUG THM Mock-up Test (ELF-China-Pilot), Teilprojekt F	<b>Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Eggenstein- Leopoldshafen</b>	📖 100
<b>02 E 11860A</b>	Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt A	<b>Johannes Gutenberg- Universität Mainz</b>	📖 102
<b>02 E 11860B</b>	Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt B	<b>Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e. V.</b>	📖 104
<b>02 E 11860C</b>	Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt C	<b>Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Eggenstein- Leopoldshafen</b>	📖 106
<b>02 E 11860D</b>	Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt D	<b>Universität des Saar- landes</b>	📖 108
<b>02 E 11860E</b>	Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt E	<b>TU München</b>	📖 110
<b>02 E 11860F</b>	Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt F	<b>Universität Potsdam</b>	📖 112
<b>02 E 11860G</b>	Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt G	<b>TU Dresden</b>	📖 114
<b>02 E 11860H</b>	Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt H	<b>Universität Heidel- berg</b>	📖 116
<b>02 E 11890A</b>	Verbundprojekt: Entwicklung und Test eines erweiterten Hoek-Brown Stoffmodells zur Berücksichtigung anisotropen Festigkeitsverhaltens bei der Anwendung der Integritätskriterien für kristalline Wirtsgesteine (BARIK), Teilprojekt A	<b>BGE Technology GmbH, Peine</b>	📖 132
<b>02 E 11890B</b>	Verbundprojekt: Entwicklung und Test eines erweiterten Hoek-Brown Stoffmodells zur Berücksichtigung anisotropen Festigkeitsverhaltens bei der Anwendung der Integritätskriterien für kristalline Wirtsgesteine (BARIK), Teilprojekt B	<b>Technische Universi- tät Bergakademie Freiberg</b>	📖 134
<b>02 E 11941</b>	Wissenschaftliche Grundlagen zum Nachweis der Langzeitsicherheit von Endlagern (WiGru-9)	<b>Gesellschaft für An- lagen- und Reaktor- sicherheit (GRS) gGmbH, Köln</b>	📖 148





**D Querschnittsaufgaben**

**D1 Wissens- und Kompetenzmanagement**





## D2 Sozio-technische Fragestellungen

<b>02 E 11849A</b>	Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt A	<b>TU Clausthal, Clausthal-Zellerfeld</b>	📖 178
<b>02 E 11849B</b>	Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt B	<b>Christian-Albrechts-Universität zu Kiel</b>	📖 180
<b>02 E 11849C</b>	Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt C	<b>Freie Universität Berlin</b>	📖 182
<b>02 E 11849D</b>	Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt D	<b>Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Eggenstein-Leopoldshafen</b>	📖 184
<b>02 E 11849E</b>	Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt E	<b>Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Eggenstein-Leopoldshafen</b>	📖 186
<b>02 E 11849F</b>	Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt F	<b>Leibniz Universität Hannover</b>	📖 188
<b>02 E 11849G</b>	Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt G	<b>Öko-Institut. Institut für angewandte Ökologie e. V.</b>	📖 190
<b>02 E 11849H</b>	Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt H	<b>TU Berlin</b>	📖 192
<b>02 E 11849I</b>	Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt I	<b>TU Carolo-Wilhelmina zu Braunschweig</b>	📖 194
<b>02 E 11849J</b>	Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt J	<b>Universität Kassel</b>	📖 196



**D3 Kernmaterialüberwachung**

- |                  |   |  |   |
|------------------|---|--|---|
| <b>02 W 6279</b> | Neu- und Weiterentwicklung von Konzepten, Methoden und Techniken für die internationale Kernmaterialüberwachung, insbesondere im Rahmen der nuklearen Entsorgung (SAFEGUARDS-3) | <b>Forschungszentrum Jülich</b>                            |  198 |
| <b>02 W 6281</b> | Antineutrino-Detektion zur Überwachung radioaktiver Abfälle (NU-SAFEGUARDS)   | <b>Rheinisch-Westfälische Technische Hochschule Aachen</b> |  200 |



## **2 Formalisierte Zwischenberichte**

### **2.1 Vorhaben Bereich C1 – C3**

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Dr. Andreas Hampel, Grünberger Str. 56, 55129 Mainz		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11446A</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Weiterentwicklung und Qualifizierung der gebirgsmechanischen Modellierung für die HAW-Endlagerung im Steinsalz (WEIMOS), Teilprojekt A		
<b>Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit</b> Bereich C3: Sicherheitsnachweis, Feld: 3.1		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.04.2016 bis 30.09.2022	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2022 bis 30.06.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 723.810,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Hampel	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

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

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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



### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

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

Im Berichtszeitraum schloss der ZE die Berechnungen der beiden Virtuellen Demonstratoren (VD) aus AP5 mit seinem weiterentwickelten Stoffmodell CDM ab. Mit dem VD I wurde die Fähigkeit des Stoffmodells demonstriert, den Rückgang der Schädigung und Dilatanz („Verheilung“) im Konturbereich einer Strecke nach dem Einbau eines Dammbauwerks zu modellieren. Mit Simulationen des VD II wurde insbesondere der große Einfluss des auf Extensionsbelastungen zurückzuführenden Anteils der Schädigung auf die Entwicklung der Schädigungszone an der Kontur einer Strecke demonstriert (Zugschädigung und Zugversagen in der DRZ: *damaged rock zone*). Bei den Simulationen beider VD zeigt sich auch, dass das in den WEIMOS-Laborversuchen nachgewiesene erhöhte Kriechvermögen bei kleinen Deviatorspannungen unter ca. 6 MPa, die untertage vorherrschend sind, einen erheblichen Einfluss nicht nur auf die Konvergenz untertägiger Hohlräume, sondern auch auf die Schädigungs- und Dilatanzentwicklung in der Schädigungszone um Hohlräume herum hat. Dies unterstreicht die Bedeutung der zuverlässigen Modellierung der genannten Phänomene mit Stoffmodellen für Steinsalz.

Der ZE erstellte eine Präsentation über die Arbeiten und Ergebnisse des Verbundes in AP5 für die Saltmech-X-Konferenz im Juli 2022 in Utrecht/NL und verfasste dazu eine Veröffentlichung für die Proceedings. Außerdem stellte er seinen Ergebnisbericht zum Verbundprojekt WEIMOS fertig und begann mit dem Verfassen des gemeinsamen Syntheseberichtes.

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

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Der ZE wird die Erstellung des Syntheseberichtes fortsetzen und abschließen. Die Ergebnisberichte der Partner bilden zusammen mit dem Synthesebericht den Abschlussbericht zum Verbundprojekt WEIMOS.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Hampel, A., C. Lüdeling, R.-M. Günther, J.Q. Sun-Kurczinski, R. Wolters, U. Düsterloh, K.-H. Lux, S. Yıldırım, D. Zapf, S. Wacker, I. Epkenhans, J. Stahlmann, B. Reedlunn (2022): WEIMOS: Simulations of two geomechanical scenarios in rock salt resembling structures at WIPP. S. 421-435\*)

Lüdeling, C., R.-M. Günther, A. Hampel, J.Q. Sun-Kurczinski, R. Wolters, U. Düsterloh, K.-H. Lux, S. Yıldırım, D. Zapf, S. Wacker, I. Epkenhans, J. Stahlmann & B. Reedlunn (2022): WEIMOS: Creep of Rock Salt at Low Deviatoric Stresses. S. 130-140\*)

Wolters, R., J.Q. Sun-Kurczinski, U. Düsterloh, K.-H. Lux, R.-M. Günther, C. Lüdeling, A. Hampel, S. Yıldırım, D. Zapf, S. Wacker, I. Epkenhans, J. Stahlmann & B. Reedlunn (2022): WEIMOS: Laboratory investigation and numerical simulation of damage reduction in rock salt. S. 190-199\*)

S.R. Sobolik, C. Vignes, S. Buchholz, E. Keffeler & B. Reedlunn (2022): WEIMOS: Shear behaviors of bedded salt clay seams and their impact on disposal room porosity. S. 168-179\*)

\*) J.H.P. de Bresser, M.R. Drury, P. A. Fokker, M. Gazzani, S.J.T. Hangx, A.R. Niemeijer, C.J. Spiers (eds.): The Mechanical Behavior of Salt X. Proceedings of the 10th Conference on the Mechanical Behavior of Salt (SaltMech X), Utrecht, The Netherlands, 06-08 July 2022. CRC Press/Balkema, Leiden (Taylor & Francis Group). ISBN: 978-1-032-28220-6, DOI: 10.1201/978100329580

<b>Zuwendungsempfänger:</b> IfG Institut für Gebirgsmechanik GmbH, Friederikenstr. 60, 04279 Leipzig		<b>Förderkennzeichen:</b>  <b>02 E 11446B</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Weiterentwicklung und Qualifizierung der gebirgsmechanischen Modellierung für die HAW-Endlagerung im Steinsalz (WEIMOS), Teilprojekt B		
<b>Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit</b> Bereich C3: Sicherheitsnachweis, Feld: 3.1		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.04.2016 bis 31.03.2022	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2022 bis 31.03.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 1.005.576,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Lüdeling	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

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

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Das IfG beteiligte sich an den Projektworkshops 32 und 33 und weiteren Abstimmungsgesprächen, die im Berichtszeitraum online stattfanden.

Angesichts des Projektendes zum 31.03.2022 konzentrierten sich die Arbeiten auf den Abschluss letzter noch offener Arbeiten, die Vorbereitung des IfG-Abschlussberichtes und Zuarbeiten für die Erstellung des Syntheseberichtes. Daneben wurden drei Beiträge für die SaltMech X verfasst (davon einer (zum Kriechen bei kleinen Spannungen) federführend von IfG) und mit den Partnern abgestimmt.

Im AP1 wurde der Langzeittemperaturwechselversuch TCC34 fortgesetzt. Die Laststufe von 4 MPa wurde und die Temperatur von 373 K, die gegen Ende 2021 eingestellt wurde, wurden beibehalten. Die aktuelle Stufe dient damit als Wiederholung der zweiten Lastphase. Der Versuch wird auch über das Projektende hinaus fortgesetzt, um die erste Lastphase (bei 393 K) auch noch zu wiederholen. Die Auswertung zeigt, dass die Kriechraten in den wiederholten Stufen sehr nahe an den Raten bei der Erstbelastung liegen. Die Grundidee der Versuchsführung wird damit weiter bestätigt. Details der Ergebnisse sind auch der SaltMech-Veröffentlichung zu entnehmen.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Das Forschungsprojekt wurde Ende März 2022 abgeschlossen. In den nächsten Monaten steht noch die Erstellung der Abschlussberichte an.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

C. Lüdeling, R.-M. Günther, A. Hampel, J. Sun-Kurczinski, R. Wolters, U. Düsterloh, K.-H. Lux, S. Yildirim, D. Zapf, S. Wacker, I. Epkenhans, J. Stahlmann & B. Reedlunn (2022): WEIMOS: Creep of rock salt at low deviatoric stresses. In: J.H.P. de Bresser et al. (Hrsg.): Mechanical Behavior of Salt X. DOI: 10.1201/9781003295808

R. Wolters, J.Q. Sun-Kurczinski, U. Düsterloh, K.-H. Lux, R.-M. Günther, C. Lüdeling, A. Hampel, S. Yildirim, D. Zapf, S. Wacker, I. Epkenhans, J. Stahlmann & B. Reedlunn (2022): WEIMOS: Laboratory investigation and numerical simulation of damage reduction in rock salt. In: J.H.P. de Bresser et al. (Hrsg.): Mechanical Behavior of Salt X. DOI: 10.1201/9781003295808

A. Hampel, C. Lüdeling, R.-M. Günther, J.Q. Sun-Kurczinski, R. Wolters, U. Düsterloh, K.-H. Lux, S. Yildirim, D. Zapf, S. Wacker, I. Epkenhans, J. Stahlmann, B. Reedlunn (2022): WEIMOS: Simulations of two geomechanical scenarios in rock salt resembling structures at WIPP. In: J.H.P. de Bresser et al. (Hrsg.): Mechanical Behavior of Salt X. DOI: 10.1201/9781003295808

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Leibniz Universität Hannover, Welfengarten 1, 30167 Hannover		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11446C</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Weiterentwicklung und Qualifizierung der gebirgsmechanischen Modellierung für die HAW-Endlagerung im Steinsalz (WEIMOS), Teilprojekt C		
<b>Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit</b> Bereich C3: Sicherheitsnachweis, Feld: 3.1		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.04.2016 bis 31.03.2022	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2022 bis 31.03.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 526.725,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Zapf	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

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

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

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

In dem Berichtszeitraum hat der Zuwendungsempfänger (ZE) die Untersuchungen abgeschlossen und seinen Endbericht zum Vorhaben zusammengestellt.

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

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Keine. Projekt beendet.

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

Keine.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Technische Universität Carolo-Wilhelmina zu Braunschweig, Universitätsplatz 2, 38106 Braunschweig		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11446D</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Weiterentwicklung und Qualifizierung der gebirgsmechanischen Modellierung für die HAW-Endlagerung im Steinsalz (WEIMOS), Teilprojekt D		
<b>Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit</b> Bereich C3: Sicherheitsnachweis, Feld: 3.1		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.04.2016 bis 31.03.2022	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2022 bis 31.03.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 427.816,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Stahlmann	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

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

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

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

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

Im Berichtszeitraum wurde der Abschlussbericht für das Verbundprojekt verfasst. Alle wesentlichen Erkenntnisse, die während der gesamten Laufzeit in den einzelnen Arbeitspaketen erlangt wurden, wurden in Textform zusammengetragen. Mit der finalen Version des Stoffmodells TUBSSalt wurden außerdem die für den Abschlussbericht relevanten Berechnungen erneut durchgeführt, um die Ergebnisse anschließend für den Bericht aufzuarbeiten.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Das Verbundprojekt endete am 31.03.2022.

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

Keine.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Technische Universität Clausthal, Adolph-Roemer-Str. 2a, 38678 Clausthal-Zellerfeld		<b>Förderkennzeichen:</b>  <b>02 E 11446E</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Weiterentwicklung und Qualifizierung der gebirgsmechanischen Modellierung für die HAW-Endlagerung im Steinsalz (WEIMOS), Teilprojekt E		
<b>Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit</b> Bereich C3: Sicherheitsnachweis, Feld: 3.1		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.04.2016 bis 31.03.2022	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2022 bis 31.03.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 784.171,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Lux	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

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

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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



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

Aufgrund der COVID-19-Pandemie führten die Projektpartner im Berichtszeitraum die Projekt-Workshops 32 und 33 online durch. Auf den Projekt-Workshops stellte der Zuwendungsempfänger aktuelle Projektthemen mit Fokussierung auf Arbeiten in AP2 und AP5 sowie ihre geplanten Beiträge bei der SaltMech X vor.

Im Berichtszeitraum wurde im Rahmen des AP2 die Verheilungsversuchsserie 4g) fortgesetzt, um das Verheilungsverhalten des verbleibenden WIPP-Prüfkörpers zu untersuchen. Leider scheint der Versuch aber letztendlich doch von den drei simultan untersuchten und bereits in der Schädigungsphase zerbrochenen Prüfkörpern beeinflusst worden zu sein. Die Messwerte zur Dilatanrückbildung zeigen unplausible Ergebnisse, so dass von einer Wechselwirkung zwischen den Versuchsanlagen auszugehen ist.

Der Fokus der Projektarbeit lag im Berichtszeitraum auf der Erstellung des Einzel-Abschlussberichts.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Keine.

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

Keine.

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11466</b>	
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Entwicklung von Rechenmodulen für die integrierte Modellierung von Transportprozessen im einschlusswirksamen Gebirgsbereich (RepoTREND+)			
<b>Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit</b> Bereich C3: Sicherheitsnachweis, Feld: 3.3			
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.04.2016 bis 30.09.2022		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2022 bis 30.06.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 2.758.255,00 EUR		<b>Projektleiter:</b> Reiche	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

#### AP1:

Folgende Konzepte wurden entwickelt:

- Konzepte für die Infrastruktur zum Schadstofftransport:
  - Strukturen zur Datenhaltung,
  - Aufbereitung von Inputparametern,
  - Ausgabe der Ergebnisse.
- Beim Berechnen des Schadstofftransports wurden spezifische numerische Probleme festgestellt wie z. B. das Rechnen mit sehr kleinen Zahlen oder eine extreme Sensibilität bei der Festlegung der Zeitschrittweite. Es wurden Konzepte zur Behebung dieser Probleme entwickelt.
- Ein erstes, vereinfachtes Konzept zur Nuklidmobilisierung.

Die XENIA-Module, die für die Definition eines Nahfeld-Rechenlaufs erforderlich sind, wurden weiterentwickelt. Speziell ist die Definition von einigen radionuklidspezifischen Parametern hinzugekommen.

#### AP3:

Die Umsetzung von bereits existierenden Konzepten wurde fortgesetzt. Die Umsetzung der neu entwickelten, im vorigen Absatz genannten Konzepte ist fortgeschritten. Aktuell können erste Schadstofftransportrechnungen durchgeführt werden, bei denen advektiver und diffusiver Transport berücksichtigt werden kann.

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

#### AP4:

Es wurden erste Testrechnungen zum Radionuklidtransport konzipiert und durchgeführt.

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

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

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

#### AP6:

Der vorliegende Bericht wurde erstellt.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

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

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<b>Auftragnehmer:</b> BGE Technology GmbH, Eschenstr. 55, 31224 Peine		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11577A</b>	
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Sicherheitsanalytische Untersuchungen zu Endlagersystemen im Kristallin (SUSE), Teilprojekt A			
<b>Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit</b> Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte, Feld: 2.3			
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.06.2017 bis 31.05.2023		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2022 bis 30.06.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 1.0502.960,74 EUR		<b>Projektleiter:</b> Dr. Müller	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Bemessung des geotechnischen Verschlussystems
- AP2: Gesteinseignungsklassifikationen als Positionierungskriterien für Dichtelemente, Bohrlöcher und Auffahrungen im Kristallin
- AP3: Charakterisierung eines Kluft- und Störungszonennetzwerkes am Beispiel des Standortes Yeniseysky
- AP4: Erhebung zusätzlicher Daten an Probenmaterial aus dem Gebiet Yeniseysky
- AP5: Regionale 3D-Strömungs- und Transportmodelle
- AP6: Bewertung und Dokumentation
- AP7: Unterstützung bei der methodischen Planung des Untertagelabors und Spezifizierung des In-Situ-Forschungs- und Entwicklungsbedarfs

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP5.5: Ziel dieses APs ist der Vergleich mehrerer Modellierungsansätze, die zur Simulation von Strömungs- und Transportprozessen in geklüfteten Gesteinen typischerweise verwendet werden.

Im Vergleich berücksichtigt sind der *fracture continuum* Ansatz, zwei Upscaling-Ansätze (*Oda*-Ansatz und das Python Skript *mapDFN*) sowie ein *discrete fracture network* (DFN) basierter Ansatz. Durch den Vergleich sollen Ungewissheiten charakterisiert werden, die bei der Implementierung des numerischen Modells aus dem geologischen Modell entstehen und mit dem entsprechenden Modellierungsansatz verbunden sind. Der erste Benchmarkfall (30° geneigte Einzelkluft) der im letzten Jahr spezifizierten Benchmarkmodellierungen wurde umgesetzt. Die oben genannten und getesteten numerischen Ansätze zeigen dabei z. T. deutliche Unterschiede zur analytischen Lösung. Für den *fracture continuum* Ansatz kann geschlossen werden, dass mit einer Verfeinerung der Diskretisierung der Kluftzonen und einer Verwendung isotroper Permeabilitätswerte die besten Werte erzielt werden konnten. Je nach verwendetem Berechnungscode ergeben sich dabei Fehler im Bereich 9-11 %. Der *mapDFN*-Ansatz nutzt anisotrope Permeabilitätswerte, eliminiert aber die Nebendiagonalstellen des Permeabilitätstensors. Daraus ergeben sich deutliche Abweichungen zur analytischen Lösung. Der *Oda*-Ansatz zeigt Fehler im Bereich 9-16 %. Der *DFN*-basierte Ansatz, der in Zusammenarbeit UA TU Bergakademie Freiberg entwickelt wird und in OGS umgesetzt wird, liefert exakt das Ergebnis der analytischen Lösung. Die Kluft wird hier im Modell als niederdimensionales Element abgebildet und der Durchfluss auf Basis des kubischen Gesetzes gelöst.

Allgemeines: Am 04.03.2022 und 06.05.2022 fanden Projektgespräche für AP5 gemeinsam mit UA TU Bergakademie Freiberg statt, in denen die Ergebnisse der Modellierungen diskutiert wurden. In diesem Zusammenhang wurden auch die Auswirkungen der Einstellung der Kooperation mit den russischen Kooperationspartner IBRAE und NO.RAO auf die Modellierungen diskutiert. Der von den russischen Kollegen im Zuge der Benchmarkfälle geplante *DFN*-basierte Ansatz kann aufgrund der Sanktionen leider nicht berücksichtigt werden. Der von der TU Bergakademie Freiberg entwickelte Ansatz stellt in dieser Hinsicht allerdings eine gute Alternative dar.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

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

AP5.5: Die weiteren Benchmarkberechnungen sollen mit den genannten Modellierungsansätzen fortgeführt werden.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Müller, C.; Barsch, M.; Burlaka, V.; Flügge, J.; Hassanzadegan, A.; Johnen, M.; Nagel, T.; Zhao, H.: „From fractures to models: It’s all about networking”. DAEF-Konferenz “Challenges of a Site Selection Process: Society – Procedures – Safety”, 04.-06.07.2022, Köln

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11577B</b>	
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Sicherheitsanalytische Untersuchungen zu Endlagersystemen im Kristallin (SUSE), Teilprojekt B			
<b>Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit</b> Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte, Feld: 2.3			
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.06.2017 bis 31.05.2023		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2022 bis 30.06.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 1.704.840,00 EUR		<b>Projektleiter:</b> Dr. Flügge	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Bei der Durchführung des Vorhabens werden folgende Arbeitspakete bearbeitet:

- AP1: Bemessung des geotechnischen Verschlussystems
- AP2: Gesteinseignungsklassifikationen als Positionierungskriterien für Dichtelemente, Bohrlöcher und Auffahrungen im Kristallin
- AP3: Charakterisierung eines Kluff- und Störungszonennetzwerkes am Beispiel des Standortes Yeniseysky
- AP4: Erhebung zusätzlicher Daten an Probenmaterial aus dem Gebiet Yeniseysky
- AP5: Regionale 3D-Strömungs- und Transportmodelle
- AP6: Bewertung und Dokumentation
- AP7: Unterstützung bei der methodischen Planung des Untertagelabors und Spezifizierung des In-situ-Forschungs- und Entwicklungsbedarfs

Die GRS ist federführend in den AP4 und AP5.

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Zur Diskussion der Ergebnisse und zur Absprache der weiteren Arbeiten wurden am 16.02.2022 (AP4), 04.03.2022 und 06.05.2022 (AP3 und 5, gemeinsam mit UAN TU BAF) Arbeitsgespräche mit BGR und BGE TEC durchgeführt.

Die Kooperation mit den russischen Kooperationspartnern IBRAE und NO.RAO wurde eingestellt. Die Projektziele wurden dementsprechend angepasst. Um das Laborprogramm (AP4) weiterführen und abschließen zu können, wurden Gespräche mit SÚRAO (CZ) zur Möglichkeit der Übergabe von Kernmaterial aus dem URL Bukov geführt. Derzeit werden eine mögliche Probenübergabe und die von BGR und GRS durchzuführenden Untersuchungen abgestimmt.

AP4: Ein detailliertes Konzept einer gemeinsamen experimentellen Untersuchung der Sorptionseigenschaften eines karbonatischen Kluftmaterials und des angrenzenden Kristallgesteins der BGR (petrografische, XRD-, XRF-, spektroskopische und elektronenmikroskopische Analysen) und der GRS (Auslaugungsversuche und Totalaufschlüsse, ICP-MS/OES-Messungen) wurde entwickelt. Weil keine Beteiligung einer russischen Institution an der Zusammenarbeit und keine Übergabe der Proben aus Russland mehr möglich ist, wird eine Anschaffung der Proben aus dem URF Bukov im dritten Quartal 2022 angestrebt.

AP5: Die Testrechnungen wurden weitergeführt. Die Ergebnisse der Testrechnungen wurden mit BGE TEC und UAN TU BAF intensiv diskutiert. Es stellte sich heraus, dass keiner der gewählten Ansätze zum fracture continuum Ansatz zufriedenstellende Ergebnisse lieferte. Ein weiterer Ansatz, bei dem eine der Grenzflächen zwischen der treppenförmigen Kluft und der Matrix als niederdimensionale, ebenfalls treppenförmige Kluft im Modell umgesetzt wird, lieferte hingegen eine gute Übereinstimmung mit der analytischen Lösung. Die Umsetzung der Kluft im Modell muss jedoch bisher manuell umgesetzt werden. Eine mögliche Umsetzung für eine größere Anzahl von Klüften ist zu prüfen. Für die Benchmark-Rechnungen wird daher seitens GRS der beschriebene und der Oda-Ansatz verwendet. Vergleiche der Ergebnisse der Benchmark-Rechnungen mit den russischen Partnern werden nicht mehr durchgeführt.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

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

AP4: Durchführung von Auslaugungsversuchen und Totalaufschlüssen, ICP-MS/OES-Messungen

AP5: Durchführung der Benchmark-Modellrechnungen; Überprüfung der Anwendungsmöglichkeit der Strömungsmodelle im Hinblick auf Transportberechnungen, vergleichende Analysen im Hinblick auf Transportmodellierungen; Durchführung von Strömungs- und Transportberechnungen

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Müller, C.; Barsch, M.; Burlaka, V.; Flügge, J.; Hassanzadegan, A.; Johnen, M.; Nagel, T.; Zhao, H: „From fractures to models: It’s all about networking”. DAEF-Konferenz “Challenges of a Site Selection Process: Society – Procedures – Safety”, 04.-06.07.2022, Köln

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11607A</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Verhalten langlebiger Spalt- und Aktivierungsprodukte im Nahfeld von Endlagern unterschiedlicher Wirtsgesteine und Möglichkeiten ihrer Rückhaltung (VESPA II), Teilprojekt A		
<b>Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit</b> Bereich C3: Sicherheitsnachweis, Feld: 3.1		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2017 bis 30.06.2022	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2022 bis 30.06.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 1.107.813,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Hagemann	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

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

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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



### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Die Versuche zur Bestimmung des Reduktionsverhaltens von Se in salinaren Lösungen wurden beendet. Sie zeigen unter welchen Bedingungen und mit welcher Geschwindigkeit Selenit und Selenat durch Reaktion mit metallischem Eisen sowie Fe(II)-haltigen Korrosionsprodukten (Parahibbingit, Chukanovit) reduziert werden. Der Vergleich der Reduktion der Selenit-Konzentration in der Lösung in Anwesenheit von metallischem Eisen zeigt, dass bereits nach einem Tag in allen Proben (NaCl-FeCl<sub>2</sub>-Matrix mit Parahibbingit, Chukanovit oder nur FeCl<sub>2</sub>-Lösung) mehr als 70 %, nach acht Tagen 95-100 % der ehemaligen Selen-Konzentration nicht mehr vorhanden sind. Im Falle der Anwesenheit von Selenat in Lösung, geht die Reduktion wesentlich langsamer vor sich. Hier war nur in den Proben mit Parahibbingit nach 70 d eine mehr als 90 %ige Reduktion der Selenat-Konzentration zu sehen, in den Proben mit Chukanovit und FeCl<sub>2</sub> (aq) nur eine 20 %ige bzw. 12 %ige Reduktion. Betrachtet man die Kinetik der Selenit-Reduktion in An- und Abwesenheit von metallischem Eisen, so zeigt sich kein Unterschied bei den Korrosionsprodukten Parahibbingit und Chukanovit. Wenn dagegen kein Korrosionsprodukt vorliegt, sondern nur FeCl<sub>2</sub> in Lösung, so ist die Se-Reduktion in Lösung bei Vorhandensein von metallischem Eisen sowohl nach 8 als auch nach 70 Tagen um etwa 20 % größer. Dass es sich dabei nicht nur um einen einfachen Niederschlag von Selenit handelt, sondern um eine Redoxreaktion und damit einer Reduktion des Selenits, zeigt die rostige Färbung (Fe<sup>3+</sup>-Bildung) dieser Proben. Im Falle von Selenat in Lösung ist die Reaktion bei einer kurzen Dauer (8 d) kinetisch deutlich langsamer, wenn kein metallisches Eisen in der Probe vorliegt. Nach 70 d dagegen ist dieser Unterschied praktisch nicht mehr vorhanden.

Die Untersuchung der Eisenbleche aus den Selen-Reduktionsproben mittels SEM-XPS zeigen zum einen Selen auf der Oberfläche der Eisenbleche. Zum anderen konnte hiermit nachgewiesen werden, dass das Se in Selenid (Se<sup>2-</sup>) reduziert wurde.

Eine zweite Reihe von Löslichkeitsversuchen zur Untersuchung eines löslichkeitserhöhenden Effekts von Pb<sup>II</sup>, Ni<sup>II</sup>, Pd<sup>II</sup> und Sn<sup>IV</sup> in calciumreichen Lösungen bei einem pcH von 10-12 und unterschiedlichen Calcium-Konzentration wurden durchgeführt. In Kombination mit vorherigen Untersuchungen verdichten sich die Hinweise, dass insbesondere Sn(IV) eine starke Komplexbildung mit Calcium in alkalischen Lösungen zeigt.

Auf Basis aktuell diskutierter Einlagerungskonzepte wurde für zwei Fälle (Bohrlochlagerung in Salz oder Ton) plausible geochemische Randbedingungen zum Zeitpunkt des unterstellten Lösungszutritts zu den Abfällen berechnet. Dies bestehen aus Lösungszusammensetzung, pH-Wert, Redoxniveau und den Massen der erwarteten Sekundärmineralen in Folge der Korrosion. Die Randbedingungen dienen als Grundlage für Stoffausbreitungsrechnungen in der Umgebung der Endlagerbehälter.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Keine. Projektende.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e. V., Bautzner Landstr. 400, 01328 Dresden		<b>Förderkennzeichen:</b>  <b>02 E 11607B</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Verhalten langlebiger Spalt- und Aktivierungsprodukte im Nahfeld von Endlagern unterschiedlicher Wirtsgesteine und Möglichkeiten ihrer Rückhaltung (VESPA II), Teilprojekt B		
<b>Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit</b> Bereich C3: Sicherheitsnachweis, Feld: 3.1		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.09.2017 bis 30.06.2022	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2022 bis 30.06.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 687.696,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Müller	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP1: Sorptionsprozesse

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

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

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

AP2: Tc-Chemie inklusive niedriger Oxidationsstufen

AP3: Datentransfer zur Langzeitsicherheitsanalyse

AP4: Erstellung Abschlussbericht

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

#### AP1:

- Detaillierte Untersuchungen (Batch Sorption) der Tc-Retention an Sulfid-vorsorbierten Aluminiumoxid Nanopartikeln. Die Reduktion von Tc(VII) zu Tc(IV) nimmt mit abnehmendem pH-Wert zu und erreicht das Maximum der Entfernung nach einem Tag in Kontakt mit dem auf Aluminiumoxid sorbiertem S(-II).
- Weiterführung der elektrochemischen Untersuchungen zur Charakterisierung und Quantifizierung von Sulfid und der Sulfidoxidaionsprodukte nach der Reaktion mit Tc(VII).
- Die Raman-Spektren der postmortalen Feststoffe zeigen das Vorhandensein mehrerer Peaks, unter denen mehrere oxidierte S-Spezies (Sulfit, Sulfat und S(0)) identifiziert wurden. Andere Peaks müssen noch identifiziert werden, unter ihnen ein Peak, der sowohl bei pH 5,5 als auch bei pH 6,5 auftritt und ein weiterer, der nur bei pH 5,5 beobachtet wird. Diese Peaks können mit den nach der Reaktion gebildeten Tc-S-Spezies assoziiert werden und belegen, dass Tc(IV) bei pH 5,5 und pH 6,5 durch unterschiedliche Mechanismen immobilisiert wird, wie bereits in EXAFS-Experimenten beobachtet wurde.

#### AP2:

- Neueinreichung des Manuskriptes zur Tc-Elektrochemie bei ACS Inorganic Chemistry.

#### AP3:

- Zusammenstellung der Batch-Sorptionsdaten und Datentransfer zur Langzeitsicherheitsanalyse (GRS).

#### AP4:

- Mit Projektpartnern: gemeinsame Erstellung eines Dokuments zum aktuellen Wissensstand zum Verhalten von Spaltprodukten im Nahfeld eines Endlagers.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

#### AP1:

- Detaillierte Auswertung der Daten zum Tc Rückhalt an S(-II) und Sn(II) vorsorbiertem Aluminiumoxid und Erstellung von entsprechenden Manuskripten zur Einreichung in peer-review Journalen.

#### AP4:

- Erstellung des Abschlussberichtes.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Rodríguez, D. M.; Mayordomo, N.; Parra-Puerto, A.; Schild, D.; Brendler, V.; Stumpf, T.; Müller, K. (2022): Exploring the Reduction Mechanism of <sup>99</sup>Tc(VII) in NaClO<sub>4</sub>: A Spectro-Electrochemical Approach, *Inorg. Chem.*, 61, 10159-10166

Vortrag und Posterpräsentation bei der RadChem Konferenz, 15.-22.05.22 in Marienbad, CZ

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Hermann-von-Helmholtz-Platz 1, 76344 Eggenstein-Leopoldshafen		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11607C</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Verhalten langlebiger Spalt- und Aktivierungsprodukte im Nahfeld von Endlagern unterschiedlicher Wirtsgesteine und Möglichkeiten ihrer Rückhaltung (VESPA II), Teilprojekt C		
<b>Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit</b> Bereich C3: Sicherheitsnachweis, Feld: 3.1		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.09.2017 bis 30.06.2022	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2022 bis 30.06.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 661.628,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Altmaier	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

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

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

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

- AP1: (i) Abschluss der orientierenden Löslichkeitsexperimente (aus Unter- und Übersättigung) in den Systemen Tc-EDTA, Tc-NTA, Tc-Zitrat, Tc-Oxalat und Tc-Phthalat.  
(ii) XAFS Analysen in den Systemen Tc-EDTA, Tc-NTA, Tc-Zitrat, Tc-Oxalat und Tc-Phthalat.  
(iii) Systematische Löslichkeitsexperimente unter Variation verschiedener Einflussparameter im System Tc-EDTA, für welches in den Löslichkeitsexperimenten der größte Effekt gefunden wurde.  
(iv) Löslichkeitsexperimente mit Tc bei Anwesenheit von Sulfid.  
(v) Das Manuskript von DiBlasi et al. „Technetium complexation with multidentate carboxylate-containing ligands: Trends in redox and solubility phenomena“ wurde fertiggestellt und ist derzeit in interner Revision bei KIT-INE.  
(vi) Arbeiten am Abschlussbericht.
- AP2: Arbeiten am Abschlussbericht.
- AP3: (i) Durchführung und Abschluss der experimentellen Arbeiten in der Verlängerungsphase zur Tc-Rückhaltung an Fe-Phasen. Nasschemische Arbeiten und XAFS Analysen ausgewählter Proben an der INE Beamline bei KARA.  
(ii) Erstellung eines Manuskripts von Platte et al. zur I-Rückhaltung durch Fe-Phasen.  
(iii) Beginn der Erstellung eines Manuskripts zur Tc-Rückhaltung an Fe-Phasen.
- AP4: Arbeiten am Abschlussbericht.
- AP5: Es wurden von KIT-INE keine Arbeiten im Berichtszeitraum durchgeführt.
- AP6: Es wurde mit der Erstellung des Abschlussberichts begonnen.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Das Verbundprojekt VESPA II läuft zum 30.06.2022 aus. Weitere Arbeiten mit Bezug zu VESPA II fokussieren auf die Fertigstellung des Abschlussberichts für KIT-INE und die Fertigstellung von wissenschaftlichen Publikationen wie oben beschrieben.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Forschungszentrum Jülich GmbH, Wilhelm-Johnen-Straße, 52428 Jülich		<b>Förderkennzeichen:</b>  <b>02 E 11607D</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Verhalten langlebiger Spalt- und Aktivierungsprodukte im Nahfeld von Endlagern unterschiedlicher Wirtsgesteine und Möglichkeiten ihrer Rückhaltung (VESPA II), Teilprojekt D		
<b>Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit</b> Bereich C3: Sicherheitsnachweis, Feld: 3.1		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.09.2017 bis 30.06.2022	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2022 bis 30.06.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 471.605,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Deissmann	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

Innerhalb des Beitrags des IEK-6 zu VESPA II wird die Retention von Iodid an lamellaren Doppelhydroxid-Verbindungen (LDHs) im Detail untersucht. Das langlebige Isotop  $^{129}\text{I}$  spielt in vielen Analysen zur Langzeitsicherheit von tiefen geologischen Endlagern für hochradioaktive Abfälle eine große Rolle. Im Rahmen des vorgeschlagenen Projekts sollen unterschiedliche Rückhalte-mechanismen von Iodid an LDH quantitativ bewertet werden und Daten für Modellrechnungen ermittelt werden. Zusätzlich werden Daten zum Stoffinventar von  $^{129}\text{I}$  in abgebrannten Brennelementen und damit der maximal aus dem Abfall freisetzbaren  $^{129}\text{I}$ -Stoffmenge ermittelt.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Das Untersuchungsprogramm gliedert sich in 4 Arbeitspakete (AP):

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

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP1: Weiterentwicklung von für die Durchführung von Experimenten mit Radionukliden geeigneten Mikrofluidikreaktoren und Versuchsaufbauten zur Untersuchung diffusions-induzierter Fällungsprozesse (inkl. Entwicklung einer für den Einsatz in Handschuhboxen unter kontrollierter Atmosphäre geeigneten passiven Microfluidik-Variante). Qualifizierung von Verfahren zur In-situ-Identifizierung und Quantifizierung verschiedener Karbonatpolymorphe (ACC, Calcit, Vaterit) mittels optischer Mikroskopie, Raman-Spektroskopie sowie Validierung mittels Einkristallröntgenbeugungsspektrometrie.
- AP2: Durchführung verschiedener Mikrofluidik-Experimente mit den in AP1 entwickelten Verfahren zur Untersuchung der Polymorphie von  $\text{CaCO}_3$  im binären System  $(\text{Ca},\text{Ba})\text{CO}_3$ . Dabei konnte gezeigt werden, dass in den Versuchen initial amorphes Calciumcarbonat ausgefällt wird, dass sich in Vaterit und Calcit umgewandelt wird. In Anwesenheit von Ba-Ionen bildet sich ein morphologisch von der Ba-freien Phase abweichender Ba-Calcit, wohin gehend kein Einbau des  $^{226}\text{Ra}$ -Analogons Ba in Vaterit beobachtet wurde.
- AP3: Weiterentwicklung einer Methodik zur Ermittlung thermodynamischer Daten aus den Mikrofluidik-Experimenten und zur thermodynamischen Beschreibung der präzipitierten Mischkristallphasen im Hinblick auf deren langfristige Stabilität.
- AP4: Mit der Dokumentation der Ergebnisse sowie der Erstellung eines ersten Entwurfs einer Publikation über die erfolgreiche „Proof-of-Concept“ Studie wurde begonnen.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Eine weitere Optimierung des Versuchsaufbaus ist vorgesehen. Zudem sollen orientierende Experimente zur Untersuchung der Temperaturabhängigkeit der Mischkristallbildung sowie Versuche unter Verwendung von  $^{226}\text{Ra}$  auch nach Ende der eigentlichen Projektlaufzeit weitergeführt werden.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11627</b>	
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Arteigene Versatz- und Verschlussmaterialien für die Endlagerung hochradioaktiver Abfälle in Tonformationen (AVET)			
<b>Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit</b> Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte, Feld: 2.3			
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.11.2017 bis 31.10.2022		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2022 bis 30.06.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 1.813.589,00 EUR		<b>Projektleiter:</b> Dr. Zhang	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

- AP1: Ermittlung der geotechnischen Eigenschaften wie z. B. Kompaktion und Permeabilität des Ausbruchmaterials zur langfristigen Abdichtung der Endlager Hohlräume
- AP2: Ermittlung der geotechnischen Eigenschaften des kompaktierten Gemisches aus dem Ausbruchtonstein mit Bentonitzusatz zur Prüfung der Eignung für den Verschluss der Strecken und Schächte
- AP3: Ermittlung der geotechnischen Eigenschaften des Gemisches aus dem Ausbruchtonstein mit Bentonitzusatz zur Prüfung der Eignung als HAW-Buffermaterial bei hohen Temperaturen in Form von hochverdichteten Formsteinen für Auflager von Abfallbehältern und in Form von Granulat zur Verfüllung des Resthohlraums
- AP4: Untersuchung des Gastransportes in geschädigtem Tonstein zur Beteiligung am EU-Projekt EURAD im WP6-GAS



### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Zur Untersuchung von Temperatureinflüssen wurden langzeitige Versuche an zwei Bentonit-Proben mit einer Einbaudichte von  $1.4 \text{ g/cm}^3$  und zwei Tonstein-Bentonit-Proben (7/3) mit einer Einbaudichte von  $1.6 \text{ g/cm}^3$  durchgeführt.

Dabei wurden die Materialverhalten bei unterschiedlichen Temperaturen im Bereich von 23-90 °C ermittelt:

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

Die Versuche sind erfolgreich beendet und die Auswertung läuft.

Eine Reihe von weiteren Versuchen wurden zur Bestimmung von Quelldruck, Wasserpermeabilität und Gasströmungsverhalten von unterschiedlichen Mischungen aus Ausbruchtonstein und Bentonit gestartet und werden bis zum September 2022 durchgeführt bzw. ausgewertet.

Im EU-Projekt EURAD-P6-GAS wurden Laboruntersuchungen zur Ermittlung des Gasflussverhaltens von geschädigtem Tonstein durchgeführt. Dabei werden die Verheilungsverhalte der geschädigten Tonproben unter Bedingungen von Wasserinjektion und Belastungserhöhung ermittelt. Danach werden Gasdurchbruchdrücke und -permeabilitäten der wasser-gesättigten Proben bestimmt. Die Versuche werden bis zum September 2022 durchgeführt bzw. ausgewertet.

Teilnahme am International Clay Conference mit zwei Poster-Beiträgen.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Weiterführung der Versuche zur Bestimmung von Quelldruck, Wasserpermeabilität und Gasströmungsverhalten der unterschiedlichen Tonstein-Bentonit-Mischungen
- Weiterführung der Gasströmungsteste mit den verheilten Tonsteinproben

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Chun-Liang Zhang: Investigation of crushed claystone, bentonite and mixture as backfill/seal material, Poster presentation on the 8th Clay Conference in Nancy, 13-16 June 2022

Chun-Liang Zhang and Jean Talandier: Self-sealing performance of fractures in indurated claystones measured by water and gas flow, Poster presentation on the 8th Clay Conference in Nancy, 13-16 June 2022

Chun-Liang Zhang and Jean Talandier 2022: Self-sealing of fractures in indurated laystones measured by water and gas flow, Journal of Rock Mechanics and Geotechnical Engineering, <https://doi.org/10.1016/j.jrmge.2022.01.014>

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11658A</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Aktualisierung der Sicherheits- und Nachweismethodik für die HAW-Endlagerung im Tongestein in Deutschland (ANSICHT II), Teilprojekt A		
<b>Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit</b> Bereich C3: Sicherheitsnachweis, Feld: 3.2		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2018 bis 30.04.2022	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2022 bis 30.04.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 568.700,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Rübél	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

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

- AP3.1: 3D-Radionuklid-Transportrechnungen mit d<sup>3f++</sup>
- AP3.2: Integrierte 1D-Radionuklid-Transportrechnungen mit CLAYPOS
- AP3.3: Integrierte Radionuklid-Transportrechnungen mit REPOTREND
- AP3.4: Rechnungen zum Radionuklidtransport in der Gasphase mit TOUGH2
- AP3.5: Bewertung

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

- AP1: Erstellung der Beiträge für die Arbeiten der GRS zum gemeinsamen Synthesebericht.
- AP3.1: Abschluss der Modellrechnungen mit d<sup>3</sup>f++ zur Modellierung der Grundwasserbewegung und des Radionuklidtransports.
- AP3.2: Die Arbeiten sind abgeschlossen.
- AP3.3: Die Arbeiten sind abgeschlossen.
- AP3.4: Erstellung des Abschlussberichts.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Das Vorhaben endete zum 30.04.2022. Es sind keine weiteren Arbeiten geplant.

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

Rübel, A.; Gehrke A. C.: Modellierung des Radionuklidtransports im Tongestein – Aktualisierung der Sicherheits- und Nachweismethodik für die HAW-Endlagerung im Tongestein in Deutschland. GRS-668, Gesellschaft für Anlagen und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Braunschweig, 2021. ISBN: 978-3-949088-59-9

<b>Auftragnehmer:</b> BGE Technology GmbH, Eschenstr. 55, 31224 Peine		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11658B</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Aktualisierung der Sicherheits- und Nachweismethodik für die HAW-Endlagerung im Tongestein in Deutschland (ANSICHT II), Teilprojekt B		
<b>Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit</b> Bereich C3: Sicherheitsnachweis, Feld: 3.2		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2018 bis 30.04.2022	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2022 bis 30.04.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 609.290,12 EUR	<b>Projektleiter:</b> Jobmann	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Um die im Rahmen des Vorhabens ANSICHT entwickelte Nachweismethodik zu prüfen, sollen im Rahmen dieses Vorhabens weitere Einzelnachweise demonstrativ dargestellt und damit die Nachweisführung illustriert werden. Offene Fragen im Nachweissystem, die zur einwandfreien Nachweisführung geklärt werden müssen, sollen identifiziert und klar dargestellt werden. Ziel ist es, durch die verschiedenen Einzelnachweise die im Rahmen von ANSICHT entwickelte Nachweismethodik zu evaluieren, ggf. Schwachstellen aufzuzeigen und Verbesserungsansätze zu liefern. Um diese Ziele zu erreichen, werden verschiedene Einzelnachweise, die für ein geotechnisches Barrierensystem im Tongestein durchgeführt werden müssten, illustrativ ausgeführt. Gegebenenfalls werden Anpassungen an den Konzepten vorgenommen, die eine verbesserte Nachweisführung ermöglichen.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP1: Darstellung und Evaluierung des Integritätsnachweises für die geologische Barriere (Federführung BGR)

AP2: Darstellung und Evaluierung der Integritätsnachweise für das (geo)technische Barrierensystem (Federführung BGETEC)

AP3: Darstellung des radiologischen Nachweises am Rand des ewG (Federführung GRS)

AP4: Berichtswesen (Federführung (BGETEC)

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

Im Rahmen des AP4 wurden im verbliebenen Vorhabenszeitraum die Nachweise zur Stabilität gegenüber Kontakterosion und Piping (Filterstabilität), speziell des Streckenversatzes, abgeschlossen.

Der Synthesebericht, der in zusammenfassender Form die Arbeitsergebnisse der Verbundpartner beschreibt, wurde erstellt. Insgesamt lässt sich Folgendes festhalten:

Unter Berücksichtigung der Endlagersicherheitsanforderungsverordnung (EndlSiAnfV) wurden gezielt Einzelbewertungen erarbeitet und dargestellt und damit die Art der Sicherheitsbewertung illustriert. Es galt, offene Fragen, die zur Durchführung einer sicherheitlichen Bewertung geklärt werden müssen, zu identifizieren und klar darzustellen. Ziel war es, durch verschiedene Einzelbewertungen die entwickelte Methodik zu evaluieren, ggf. Schwachstellen aufzuzeigen und Verbesserungsansätze zu liefern.

Um diese Ziele zu erreichen, wurde das vorhandene Modellierungskonzept angewendet, geprüft und überarbeitet. Darüber hinaus erfolgte eine Analyse von Ungewissheiten sowie eine Analyse des Einflusses von Heterogenitäten innerhalb des Wirtsgesteins auf die Einhaltung der Kriterien zur Bewertung des einschlusswirksamen Gebirgsbereiches (ewG). Selbst der bestmögliche Standort kann mit einem ewG nur dann ein sicheres Endlager beherbergen, wenn es gelingt, die notwendigen Durchörterungen des ewG nach Abschluss der Einlagerung langzeitsicher zu verschließen. In dem Zusammenhang erfolgte eine Überarbeitung des Verschlusskonzeptes zusammen mit einer Bewertung, welche Barrieren wesentlich sind, um den sicheren Einschluss zu gewährleisten. Abgerundet wurden die Arbeiten mit einer Analyse zur Robustheit des geotechnischen Barrierensystems. Abschließend wurde gezeigt, in welcher Form eine Bewertung der radiologischen Sicherheit auf Basis der in der EndlSiAnfV spezifizierten Indikatoren durchgeführt werden kann.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Keine. Projekt beendet.

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

Jobmann, M., Gehrke, A.C., León Vargas, R.P., Maßmann, J., Rübel, A., Seidel, D., Thiedau, J. & Wunderlich, A. (2022): Methodik und Beispiele für eine Sicherheitsbewertung von Endlagersystemen im Tongestein in Deutschland, Forschungsprojekt ANSICHT-II, Synthesebericht, BGE TEC 2022-08, BGR, GRS, BGE TECHNOLOGY GmbH, Hannover, Braunschweig, Peine

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11668A</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Smart-K <sub>d</sub> in der Langzeitsicherheitsanalyse - Anwendungen (SMILE), Teilprojekt A		
<b>Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit</b> Bereich C3: Sicherheitsnachweis, Feld: 3.2		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.09.2018 bis 31.05.2024	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2022 bis 30.06.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 1.249.122,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Noseck	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Verbundprojekt SMILE (Partner: Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e.V. (HZDR) und Institut für Nukleare Entsorgung des KIT (KIT-INE)) basiert auf den Erkenntnissen der Vorhaben ESTRAL und WEIMAR, in denen das Smart-K<sub>d</sub> Konzept für Langzeitsicherheitsanalysen entwickelt, optimiert und in das Rechenprogramm r<sup>3</sup>t 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<sub>d</sub>-Matrizen  
(Ableitung thermodynamischer Sorptionsdaten und K<sub>d</sub>-Berechnung für das erweiterte Konzept)
- AP5: Großräumige Anwendungsrechnungen  
(Strömungs- und Transportrechnungen für ausgewählte Modellgebiete)
- AP6: Qualitätsmanagement/Dokumentation/Internetseite

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP1: Dokumentation der Arbeiten zur Implementierung der geochemischen Prozesse und einer Strategie zur weiteren Vorgehensweise.
- AP2: Abschluss des Testfalles „Aluminium“. Einarbeitung größerer Anpassungen in den Code. Modellrechnungen zum Testfall „Calcite depletion“.
- AP3: Abschluss der experimentellen Bestimmung von Sorptionsisothermen zum Kationenaustausch von Muskovit und erste Auswertung der Ergebnisse.  
Abschluss der Batchversuche zum Sorptionsverhalten von Ni an Quarz in Konkurrenz mit Eu sowie zur Sorption von Europium am synthetischen Sediment zur Erweiterung der Datenbasis.
- AP5: Wiederholung der in ESTRAL durchgeführten großräumigen Strömungs- und Transportrechnungen mit  $d^{3f++}$  für den konventionellen  $K_d$ -Wert, Beginn der Rechnungen für das smart  $K_d$ -Konzept, Vorbereitung der Rechnungen unter Berücksichtigung des neuen Konzepts.
- AP6: Projekttreffen mit HZDR und KIT-INE (online) zur Erstellung des Projektabschlussberichts.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- AP2: Abschluss der Arbeiten zum Testfall „Calcite Depletion“, Dokumentation der Ergebnisse.
- AP3: Weiterführende Auswertung der experimentellen Daten zur Bestimmung von Selektivitätskoeffizienten von Muskovit für relevante Kationen, Nickel und Europium.  
Erweiterung und Aktualisierung der reaktiven Stofftransportmodelle aus dem Vorhaben WEIMAR unter Anwendung der ermittelten Selektivitätskoeffizienten.
- AP5: Weiterführung der großräumigen Strömungs- und Transportrechnungen unter Anwendung des neuen Konzepts. Überprüfung der Ergebnisse hinsichtlich der Einflüsse verschiedener klimatischer Zustände auf die Radionuklidrückhaltung.
- AP6: Finales Projekttreffen mit HZDR und KIT-INE zur Fertigstellung des Projektabschlussberichts.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e. V., Bautzner Landstr. 400, 01328 Dresden		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11668B</b>
Verbundprojekt: Smart-K <sub>d</sub> in der Langzeitsicherheitsanalyse - Anwendungen (SMILE), Teilprojekt B		
<b>Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit</b> Bereich C3: Sicherheitsnachweis, Feld: 3.2		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.09.2018 bis 28.02.2022	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2022 bis 28.02.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 580.851,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Brendler	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Verbundprojekt SMILE (Partner: Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Braunschweig, und Institut für Nukleare Entsorgung des KIT (KIT-INE)) basiert auf den Erkenntnissen der Vorhaben ESTRAL und WEIMAR, in denen das Smart-K<sub>d</sub> Konzept für Langzeitsicherheitsanalysen entwickelt, optimiert und in das Rechenprogramm r<sup>3t</sup> 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 ist sowohl auf andere Formationen als auch auf andere Codes übertragbar und gestattet somit auch einen Wissenstransfer zu anderen Forschungsfeldern.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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



### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP2: Testfälle (Calcit, Gibbsite) für die Erweiterung von  $d^{3f++}$  durch GRS, als Excel-Tabellen und als PHP-Skripte
- AP3: Am KIT-INE wurde Anorthit (Ca-Feldspat) synthetisiert und die Säurekonstanten (pKa) bestimmt  
Erstellung eines Manuskripts „Retention of trivalent lanthanides (Eu, La) and actinides (Am, Cm) by natural and synthetic Ca-feldspars“
- AP4: Verbesserte Werte für die Wechselwirkung von Matrixelementen (Fe, Al) mit Oberflächen wurden in die TDB eingepflegt
- AP6: Online-Projekttreffen mit den Verbundpartnern GRS und KIT-INE, Update der Internet-Präsenz unter „[www.smartkd-concept.de](http://www.smartkd-concept.de)“

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- AP6: Fertigstellung Abschlussbericht, Einreichung des Manuskripts „Retention of trivalent lanthanides (Eu, La) and actinides (Am, Cm) by natural and synthetic Ca-feldspars“

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Bezzina, J.P., Neumann, J., Brendler, V., Schmidt, M.: “Combining Batch Experiments and Spectroscopy for realistic Surface Complexation Modelling: Sorption of Americium, Curium, and Europium onto Muscovite”. Submitted (2022) to Water Research

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie(KIT), Hermann-von-Helmholtz-Platz 1, 76344 Eggenstein-Leopoldshafen		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11668C</b>
Verbundprojekt: Smart- $K_d$ in der Langzeitsicherheitsanalyse - Anwendungen (SMILE), Teilprojekt C		
<b>Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit</b> Bereich C3: Sicherheitsnachweis, Feld: 3.2		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.09.2018 bis 28.02.2022	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2022 bis 28.02.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 117.142,34 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Lützenkirchen	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Verbundprojekt SMILE (Partner: Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e.V. (HZDR) und Institut für Nukleare Entsorgung des KIT (KIT-INE)) basiert auf den Erkenntnissen der Vorhaben ESTRAL und WEIMAR, in denen das Smart- $K_d$  Konzept für Langzeitsicherheitsanalysen entwickelt, optimiert und in das Rechenprogramm  $r^3t$  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**

AP3: Arbeiten zum Anorthit. Zeta-Potential Messungen in Abhängigkeit des pH-Wertes in NaCl und CaCl<sub>2</sub> Lösungen. Die Messungen wurden bei verschiedenen Einwaagen durchgeführt und eine Serie über längere Zeiträume wiederholt. Die Konzentrationen an Si, Al, Na und Ca in den Lösungen zu Ende des jeweiligen Experiments wurden per ICP/OES gemessen. Es zeigte sich, dass in 2 mM CaCl<sub>2</sub> reproduzierbar ein anderer Verlauf auftrat, als der, der reproduzierbar in 5 mM NaCl erhalten wurde. Die Lösungskonzentrationen deuten an, dass die Auflösung stöchiometrisch auftritt, was auch die reproduzierbaren Zeta-Potentiale erklärt. Das Anorthit wurde teilweise bei HZDR oder während eines Aufenthalts am KIT-INE durch Jessica Lessing synthetisiert.

AP3: Virtuelles Projekt Meeting.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

AP3: Säulenversuche mit dem Anorthit sind noch geplant, um die Datengrundlage zu vervollständigen. Die Säule ist bereits gepackt.

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

Keine.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Technische Universität Clausthal, Adolf-Römer-Str. 2a, 38678 Clausthal-Zellerfeld		<b>Förderkennzeichen:</b>  <b>02 E 11688</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Langzeitsicheres Abdichtungselement aus Salzschnittblöcken - Durchführung, Auswertung und Reanalyse von THM-Versuchen (Salzschnittblöcke III)		
<b>Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit</b> Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte, Feld: 2.3		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.09.2018 bis 31.08.2022	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2022 bis 30.06.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 616.650,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Düsterloh	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP1: Beschaffung von gewachsenem Steinsalz

AP2: Herstellung von Salzschnittblöcken

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

AP4: Rechnerische Reanalyse der Technikumsversuche mit Verifikation, Validation und Er-tüchtigung/Erweiterung der Berechnungssoftware

AP5: Erstellung Schlussbericht

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP1: Abgeschlossen.
- AP2: Fertigstellung der Salzschnittblöcke für einen dritten Prüfkörper mit Fugenbreite 5 mm und Salzgrusfugenfüllung.
- AP3: Durchführung und Auswertung des zweiten Prüfkörpertests mit Konfiguration der Salzschnittblock-Konstruktion ohne Fugenfüllung. Fortsetzung des mechanischen Kompaktionsversuchs für den zweiten Prüfkörper unter eingeschränkter Axialdehnung mit einer vorgegebenen Axialdeformationstoleranz und einer konstanten Mantelspannung von 12,5 MPa sowie Durchführung eines hydromechanischen Kompaktionsversuchs unter nahezu isotropen Belastungsrandbedingungen mit konstanter Mantelspannung von 12,5/8,5 MPa und entsprechender konstanter Axialspannung von 13/9 MPa bei gleichzeitiger Durchführung einer Gaspermeabilitätsuntersuchung mit verschiedenen Gasdruckgradienten.
- AP4: Durchführung und Auswertung der hydromechanisch gekoppelten Simulationen mit dem Berechnungsmodell mit einer Höhe von 1,5 m und einer Fugenbreite von 0,1 mm in FLAC3D-TOUGH3 (mit Anwendung des Stoffmodells C-WIPP-TUC-2021 zur Modellierung des Salzgrusmaterialverhaltens) und Vergleich mit den zugehörigen Laborergebnissen.
- AP5: Beginn Erstellung Abschlussbericht.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- AP3: Durchführung eines dritten Versuchs Fugenbreite 5 mm und Salzgrusfugenfüllung.
- AP4: Durchführung und Auswertung der hydromechanisch gekoppelten Simulationen mit dem Berechnungsmodell mit einer Höhe von 1,5 m und einer Fugenbreite von 0,1 mm in FLAC3D-TOUGH3 (mit Anwendung des Stoffmodells EXPO-COM zur Modellierung des Salzgrusmaterialverhaltens) und Vergleich mit den zugehörigen Laborergebnissen.
- AP5: Fortführung Erstellung Abschlussbericht.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Poster (SaltMech X): Pilot plant tests to demonstrate the functionality of sealing systems made of salt cut bricks

Düsterloh, U.; Lerche, S.; Zhao, J. (2022): Pilot plan tests to demonstrate the functionality of sealing elements made of salt cut bricks, Mechanical Behaviour of Salt X, CRC Press Balkema, Utrecht, 2022

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11698</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Untersuchung thermisch-hydraulisch-mechanisch-chemischer Einwirkungen auf zementbasierte Dichtelemente (THYMECZ)		
<b>Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit</b> Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte, Feld: 2.3		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.09.2018 bis 31.08.2022	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2022 bis 30.06.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 2.142.267,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Meyer	

### 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP1: In diesem Arbeitspaket erfolgt die Zusammenstellung bzw. Entwicklung geeigneter Untersuchungsmethoden basierend auf vorlaufenden FuE-Vorhaben. Die Treffen des Arbeitskreises Betonkorrosion (AKB) im Jahr 2021 wurden aufgrund von Corona ausgesetzt, ein nächstes Treffen ist als Präsenzveranstaltung im September 2022 abgestimmt.
- AP2: Die im AP2 vorgesehenen Versuche wurden bereits erfolgreich abgeschlossen.
- AP3: Die im AP3 vorgesehenen Versuche wurden bereits erfolgreich abgeschlossen.

- AP4: Die im AP4 vorgesehenen Versuche wurden bereits erfolgreich abgeschlossen.
- AP5: Die im AP5 vorgesehenen Versuche wurden bereits erfolgreich abgeschlossen.
- AP6: Der Aufbau des THMC-Messstandes konnte abgeschlossen werden, ein Temperaturfühler und ein Druckaufnehmer je Autoklave befinden sich noch in der Beschaffung (Juli 2022). Nachdem die in den bisherigen HMC-Untersuchungen verwendeten NBR-Manschetten Undichtigkeiten zeigten, wurden neue Vorversuche mit VITON-Manschetten durchgeführt. Nachdem ein Dichtigkeitsnachweis erfolgreich abgeschlossen werden konnte, wurde eine weitere kombinierte Probe des A1 eingebaut. Diese wird z. Z. vorkompaktiert.
- AP7: Das Modellverständnis der Korrosionsprozesse soll mit Hilfe der durchgeführten Experimente, im Besonderen auch der durchgeführten Langzeitversuche, vertieft werden. Es wurde zunächst aus THEREDA eine geeignete Datenbasis (THEREDA) erstellt. Die Modellrechnungen erfolgen parallel zur Auswertung der LZ-Korrosionsversuche (s. AP10).
- AP8: Erstellung der Dokumente zur Qualitätssicherung der Arbeiten im Projekt sowie die Erstellung des HJB und JB.
- AP9: Die seitens SNL zur Verfügung gestellten Materialien zeigten sich als ungeeignet. In einem Telefonat wurde noch einmal die weitere Vorgehensweise diskutiert und beschlossen, dass SNL die Proben selbst herstellt und der GRS im zweiten HJ 2022 zur Verfügung stellt.
- AP10: Bei den Langzeitkorrosionsexperimenten ist bereits die 5. Stufe erreicht worden, wobei eine deutliche Abnahme der jeweils resultierenden Lösungsmenge zu beobachten ist. Es wird davon ausgegangen, dass ca. 7 Stufen erreicht werden können. Z. Z. erfolgt die Auswertung der ersten 4 Stufen.  
Bei den HC-Versuchen, die in die Langzeitkorrosionsversuche überführt worden waren, konnten bei dem Baustoff A1 im Kontakt zu NaCl-Lösung die Ergebnisse des Lösungsdurchbruches der THC-Versuche (90 °C) auch an einer weiteren Probe im HC-Messstand bei 25 °C bestätigt werden.

#### **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 fortgesetzt.

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

Keine.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Technische Universität Clausthal, Adolph-Roemer-Str. 2a, 38678 Clausthal-Zellerfeld		<b>Förderkennzeichen:</b>  <b>02 E 11748A</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Strömungstechnischer Funktionsnachweis für Verschlussbauwerke und flüssigkeitsgestützte Abdichtung des Kontaktbereiches - Phase III: Vertiefung Kenntnisstand Kontaktbereich & Injektionsmittel, In-situ-Versuche (STROEFUN III), Teilprojekt A		
<b>Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit</b> Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte, Feld: 2.3		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b>  01.01.2019 bis 30.06.2022	<b>Berichtszeitraum:</b>  01.01.2022 bis 30.06.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b>  1.727.898,00 EUR	<b>Projektleiter:</b>  Prof. Dr. Langefeld	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

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

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

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

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP1: Kontaktbereich – Vertiefung Kenntnisstand

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

AP2: Materialuntersuchungen

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



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

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

- AP1: Durch Probengewinnung aus der Sohle des Kontaktbereiches Dichtbaustoff/Gebirge konnte festgestellt werden, dass es in dem Solbereich zu unterschiedlich stark ausgeprägter Anbindung zwischen dem Baustoff und dem Gebirge gekommen ist. Es scheint, dass mit zunehmendem Abstand zu den Kontaktbereichen, die im direkten Austausch mit der Grubenatmosphäre stehen, die Anbindung abnimmt. Aus welchen Gründen es zu einer abnehmenden Anbindung zwischen den Baustoffen gekommen ist, wird geprüft.
- AP2: Eigenschaftsanalyse eines selbst erstellten Injektionsmittels, welches auf Magnesia, Anhydrit und Magnesiumchloridlösung besteht.
- AP3: Arbeitspaket abgeschlossen.
- AP4: Fünf Monate nach der Dammerrichtung wurden unterschiedliche Injektionsmittel an dem Dammbauwerk getestet. Um Handhabungserfahrungen zu sammeln, wurde in dem hinteren Bereich des Dammes als erstes ein selbst erstelltes partikelgestütztes Injektionsmittel, bestehend aus Magnesia, Anhydrit und Magnesiumchloridlösung, verpresst und anschließend das Epojet LV. Bei der Verwendung des partikelgestützten Injektionsmittels gelang es, ca. 1,8 Liter bei einem Druck von 18 bar zu verpressen. Ein höherer Druck war durch einen Pumpenfehler zu diesem Zeitpunkt nicht zu realisieren. Bei der Verwendung des partikelfreien Injektionsmittels Epojet LV wurden 7,0 Liter bei einem Druck von 40 bar verpresst. Hierbei ist anzumerken, dass die Injektion nach 7,0 Litern beendet wurde, damit die Ausbreitung des Injektionsmittels eingegrenzt werden konnte.
- Sieben Monate nach der Dammerrichtung wurde versucht, in den vorderen Bereich des Dammbauwerkes mit dem feinkörnigen MFBBa der BGE zu injizieren. Es gelang nicht bei einem Druck von 70 bar zu injizieren. Bei dem Reinigen des Schlauches wurde versucht, mit der zum Spülen verwendeten Magnesiumchloridlösung abermals zu injizieren. Dies gelang, wobei bei ca. 60 bar 0,1 Liter verpresst worden ist. Dies legt nahe, dass partikellose Injektionsmittel auch noch injiziert werden können, wenn partikelgestütztes dies nicht mehr vermögen. Des Weiteren kann aus der nicht realisierten Injektion geschlussfolgert werden, dass die Konvergenz des Gebirges und die Zeit einen starken Einfluss auf die Injizierbarkeit hat.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Erstellung des Abschlussberichtes.

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

Keine.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e. V., Bautzner Landstr. 400, 01328 Dresden		<b>Förderkennzeichen:</b>  <b>02 E 11748B</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Strömungstechnischer Funktionsnachweis für Verschlussbauwerke und flüssigkeitsgestützte Abdichtung des Kontaktbereiches - Phase III: Vertiefung Kenntnisstand Kontaktbereich & Injektionsmittel, In-situ-Versuche (STROEFUN III), Teilprojekt B		
<b>Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit</b> Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte, Feld: 2.3		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.01.2019 bis 30.06.2022	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2022 bis 30.06.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 39.015,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Kulenkampff	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

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

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

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

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

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

## 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP1: Abbildungen der Kontaktzone von MgO-Beton und Salzgestein: Guter Kontakt, überwiegend keine erkennbare Fuge, Wegsamkeiten dagegen in der Auflockerungszone des Steinsalzes.

## 4. Geplante Weiterarbeiten

Erstellung des Abschlussberichtes.

## 5. Berichte, Veröffentlichungen

J. Kulenkampff: Direct tomographic observation of brine percolation into MgO shotcrete material, in: The Mechanical Behavior of Salt X - Proceedings of the 10th Conference on the Mechanical Behavior of Salt (SaltMech X) (ed. J.H.P. Bresser et al.), Utrecht, The Netherlands, 06-08 July 2022, doi.org/10.1201/9781003295808, CRC Press, London, 98-106

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Friedrich-Schiller-Universität Jena, Fürstengraben 1, 07743 Jena		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11759A</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Grimsel Felslabor: In-situ-Experimente zur Bentonit Langzeit-Stabilität und der Radionuklidmobilität an der Grenzfläche Bentonit - Kristallin (KOLLORADO-e3), Teilprojekt A		
<b>Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit</b> Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte, Feld: 2.3		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.05.2019 bis 31.12.2022	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2022 bis 30.06.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 375.308,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Schäfer	

### 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1: Insgesamt 21 Erosionsexperimenten wurden mit verschiedenen Proben tabletten von rohem MX-80 & GMZ Bentonit, sowie aufgereinigtem Na-Montmorillonit (Na-Mnt) mit einer gezielten Zugabe

von akzessorischem Quarz, (10, 20 Gew. %) und/oder Gips/Anhydrit (2-10 Gew. %), mit einer Trockendichte von ca. 1,8 g/cm<sup>3</sup> und einer konstanten Fließrate von 50 µL/min durchgeführt. Die Kontaktlösungen wurden kontinuierlich aufgefangen und standen zur weiteren chemischen und Kolloid-Analytik (Nanopartikel-Tracking-Analyse - NTA) zur Verfügung.

Verschiedene Setups von rohem oder Na-homoionisiertem Montmorillonit unter Verwendung von regulärem oder Ca-angereichertem Grimsel Grundwasser (GGW) wurden erfolgreich durchgeführt. Zu beobachten war, dass unter Verwendung von regulärem GGW und bei einer ausschließlichen Beimischung von Quarz, hohe Erosionsraten von bis zu  $1.8E+11 \pm 2.5E+09$  Partikeln pro mL gemessen werden konnten. Eine nahezu vollständige Erosion des Na-Mnt war die Folge. Identische Versuche mit Ca-angereichertem GGW wiederum führten zu einer erhöhten Erosionsbeständigkeit des Systems mit geringen Erosionsraten nahe der Hintergrundkonzentration des eingesetzten GGW ( $1.0 \pm 0.3 E+07$  Partikel/mL).

Als Ergänzung zu den bereits abgeschlossenen Experimenten wurde im Berichtszeitraum bei einer weiteren Versuchsreihe der Einfluss auf das Quell- und Erosionsverhalten von akzessorischem Gips oder Anhydrit als probeninterne Ca-Quelle unter Verwendung von regulärem GGW untersucht. Ein reduziertes Quell- aber auch Erosionsverhalten wurde dabei sowohl für Gips, als auch für Anhydrit ab einer Menge von 5 Gew. % beobachtet. Erosionskonzentrationen von durchschnittlich  $5.0 \pm 3.7E+07$  Partikeln/mL wurden beobachtet. Eine Beimischung von 2 Gew. % Gips führte lediglich zu einer Verzögerung der Ton-Erosion, mit Erosionsraten von bis zu  $1.9E+10$  Partikeln pro mL.

Zur Untersuchung der Kationenaustauschkapazität und des Austausches der Oberflächenkationen wurden zudem Experimente mit reinem Na-Mnt unter Verwendung von Ca-angereichertem GGW durchgeführt. Dabei wurden unterschiedlich schnelle Na<sup>+</sup>/Ca<sup>2+</sup> Austauschraten für verschiedene Sektionen der Proben-tabletten mit der Zeit festgestellt. Ein nahezu vollständiger Austausch ( $92.1 \pm 1.5$  %) konnte nach ca. 120 Tagen gemessen werden.

Fortgesetzt wurde auch die kontinuierliche Probennahme im i-BET Experiment im Rahmen des CFM-Projekts zum Erosionsverhalten von Bara Kade (MX-80) Bentonit und Durchführung sowie Auswertung nasschemischer (ICP-MS, IC) und Kolloid-Analysen speziell mittels NTA. Erste Diskussionen zur Quantifizierung der Erosionsraten und dem Vergleich mit der Quantifizierung aus CT-Daten des LIT Bohrkerns fanden innerhalb des CFM-Konsortiums statt.

#### 4. Geplante Weiterarbeiten

AP1: Geplant ist die quantitative Charakterisierung der Erosion des im iBET-Experiments eingesetzten MX-80 Montmorillonit (speziell zur gravimetrischen Erosion). Nach Erhalt von Sub-Samples des geschnittenen LIT-Experiment Kerns (Febex-Bentonit) soll die Untersuchung der Expansionslänge mittels Röntgenmikroskop an eingeschweißten Proben erfolgen. Die mineralogische Charakterisierung der Ton-Gelschicht und deren mögliche Transformation mittels LA-ICP-MS kann nicht wie geplant außerhalb eines Kontrollbereichs erfolgen. Die Durchführung weiterer Erosionsexperimente mit Fokus auf in-situ und post-mortem Analysen des Quellverhaltens, Quelldrucks, der NTA sowie weiterer nasschemischer Analysen ist geplant.

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

#### 5. Berichte, Veröffentlichungen

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

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Hermann-von-Helmholtz-Platz 1, 76344 Eggenstein-Leopoldshafen		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11759B</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Grimsel Felslabor: In-situ-Experimente zur Bentonit Langzeit-Stabilität und der Radionuklidmobilität an der Grenzfläche Bentonit - Kristallin (KOLLORADO-e3), Teilprojekt B		
<b>Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit</b> Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte, Feld: 2.3		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.05.2019 bis 31.12.2022	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2022 bis 30.06.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 371.183,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Marquardt	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

#### *LIT-Mock-up-Experimente*

Von dem ersten vorbehandelten Bentonitstück (Stück A) aus dem aktiven Mock-up-Test wurden in Schichtdicken von 20 bis 100  $\mu\text{m}$  Bentonitmaterial (254 Proben) mittels abrasivem Peeling abgetragen. Davon wurde von 28 Proben, die 1.5 cm Länge des Stücks A umfassen, der Gehalt an  $^{233}\text{U}$ ,  $^{237}\text{Np}$ ,  $^{242}\text{Pu}$ ,  $^{241}\text{Am}$ ,  $^{99}\text{Tc}$  und  $^{137}\text{Cs}$  mittels Gammaskopmetrie und (SF) ICP-MS analysiert, nachdem die Radionuklide vom Bentonit mit 4 M  $\text{HNO}_3$  vollständig desorbiert wurden. Die vollständige Desorption wurde nach einem Totalaufschluss ausgewählter Desorptionsproben mit  $\text{HF}/\text{HNO}_3$  bestätigt. In den 28 abgetragenen Bentonitschichten wurde kein  $^{242}\text{Pu}$ ,  $^{241}\text{Am}$ ,  $^{99}\text{Tc}$  und  $^{137}\text{Cs}$  nachgewiesen. Allerdings fand man einen relativ konstanten Gehalt an  $^{233}\text{U}$  und  $^{237}\text{Np}$ , mit Konzentrationsschwankungen zwischen 0.1 und 1  $\text{pg/g}$  für  $^{233}\text{U}$  und zwischen 1 und 10  $\text{pg/g}$  für  $^{237}\text{Np}$ . Diese relativ konstante Konzentration an Uran und Neptunium entspricht nicht einem erwarteten Diffusionsprofil und kann durch einen möglichen Gleichgewichtszustand zwischen Sorption, Desorption und Diffusion nach 5.5 Jahren Versuchsdauer erklärt werden. Weiterhin ist nicht auszuschließen, dass der Radionuklidaustrag aus zwei benachbarten Radiotracerampullen für das Konzentrationsprofil verantwortlich ist. Um dies weiter zu untersuchen, wurde ein zweites Bentonitstück (Stück B) zwischen einer Radiotracerampulle und einer Ampulle mit inaktiven Tracern beprobt und entsprechend vorbehandelt. Anders als das Stück A enthält Stück B eine nicht zerbrochene Radiotracerampulle. Proben nach abrasivem Peeling wurden bereits präpariert.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

#### *Weitere Analyse der LIT-Mock-up-Experimente und In-situ-LIT „post-mortem“ Analysen*

Ausgewählte Proben von Stück B werden gemäß Stück A zuerst mittels Gammaskopmetrie und (SF) ICP-MS analysiert. Die Radionuklide, die mit diesen beiden Methoden nicht nachgewiesen werden können sowie  $^{242}\text{Pu}$  und  $^{241}\text{Am}$  in den Proben von Stück A, werden mittels AMS bestimmt werden. Zudem wird die dritte aktive Ampulle entnommen um den Anteil der Radionuklide zu quantifizieren, der sich noch in der Bentonitmischung der Ampulle befindet und nicht durch den Bentonitring diffundiert ist.

Die In-situ-LIT-Proben aus dem Grimsel Felslabor wurden im Mai 2022 zum INE geliefert. Diese Proben werden dann einer ähnlichen Probenbehandlung unterzogen wie die Proben des Mock-up-Tests, um eine mögliche Radionuklidenausbreitung zu analysieren. Als Analysemethoden kommen Autoradiographie,  $\mu\text{CT}$ , (SF) ICP-MS sowie AMS zum Einsatz. Weitere geplante Untersuchungen wurden schon in dem vorigen Zwischenbericht beschrieben.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

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

Y. Kouhail, F. Rinderknecht, F. Quinto, F. Geyer, D. Schild, U. Noseck, H. Geckeis, B. Lanyon, R. Schneeberger, I. Blechschmidt, T. Schäfer: The fate of radionuclides during bentonite erosion: insights from the LIT experiment at Grimsel Test Site and comparison to a laboratory mock-up test. Poster-Präsentation 8th International Clay Conference in Nancy (Frankreich) Juni 2022

V. Brendler, F. Quinto, T. Schäfer: Laboratory and field research in crystalline rock. Vortrag (Country Presentation Germany) am NEA CRC-5 Meeting. Dresden (Deutschland) Juni 2022

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11759C</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Grimsel Felslabor: In-situ-Experimente zur Bentonit Langzeit-Stabilität und der Radionuklidmobilität an der Grenzfläche Bentonit - Kristallin (KOLLORADO-e3), Teilprojekt C		
<b>Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit</b> Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte, Feld: 2.3		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.05.2019 bis 31.12.2022	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2022 bis 30.06.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 316.420,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Noseck	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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



### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP2: Weiterführung und Analyse von Modellrechnungen mit PHAST zu den am FSU durchgeführten Ionenaustauschexperimenten mit vorbehandelten Montmorilloniten aus MX-80-Bentonit und Mischungen mit Quarz. Ermittlung des Einflusses von Strömungsprozessen und Ionenaustauschprozessen auf das Modell und Vergleich mit den experimentell bestimmten Werten. Vorstellung der Rechenfälle und Ergebnisse zur Simulation der Laborversuche und Diskussion der Übereinstimmungen und Abweichungen mit experimentellen Werten, die an der FSU bestimmt wurden. Vorstellung der Ergebnisse beim KOLLORADO-e3/CFM Meeting.
- Durchführung aktueller Transportrechnungen zur Diffusion von Radionukliden im Bentonit im Mock-Up Experiment zum LIT. Vergleiche der Simulationsergebnisse mit den Durchbruchkurven und aktuell ermittelter Profile von U, Np im Bentonitring. Modifikation der Geometrie und Aktualisierung der Vorhersagerechnungen zur Radionuklid-Diffusion im Bentonit auf Basis der CT-Ergebnisse zur Lage der Kluft.
- Weiterführung der Transportrechnungen zum kolloidgetragenen RN-Transport für ein potenzielles deutsches Endlagersystem. Kritische Prüfung und Diskussion aller Parameter und Parametervariationen, der Ergebnisse und Beginn der Dokumentation.
- AP3: Durchführung von bilateralen Arbeits- und Planungsgesprächen und eines KOLLORADO-e3 Projekttreffens in Jena zum Austausch von Ergebnissen und Planung der Abschlussdokumentation mit den Partnern von FSU und KIT-INE sowie Nagra, BGE und BASE.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- AP2: Weiterführung und Abschluss der Modellrechnungen mit PHAST zu den an der FSU durchgeführten Ionenaustauschexperimenten mit vorbehandelten Montmorilloniten aus MX-80 und FEBEX-Bentonit und Mischungen mit Quarz und Ca-haltigen Mineralen (Gips oder Calcit). Ermittlung des Einflusses der Gipsauflösung auf die erwarteten Ionenkonzentrationen in Lösung und Vergleich mit den experimentell bestimmten Werten. Diskussion und Austausch mit den Experimentatoren an der FSU.
- Überprüfung der Ergebnisse der Diffusionsrechnungen weiterer Radionuklide, sobald Diffusionsprofile für Mock-Up Test und LIT vorliegen. Ggf. Modifikation einzelner Parameter und Durchführung weiterer Rechnungen für die Mock-up-Experimente und LIT.
- Fertigstellung des Papers zu den thermodynamischen Benchmarkrechnungen mit den internationalen Partnern FSU, GRS, KIT-INE, UJV, JAERI, RWM, CIEMAT and KAERI. Einreichung bei Applied Geochemistry.
- Dokumentation der Transportrechnungen zum kolloidgetragenen RN-Transport für ein potenzielles deutsches Endlagersystem und Ableitung von Aussagen zur Bedeutung des kolloidgetragenen Radionuklidtransports für die Langzeitsicherheit eines Endlagers im Kristallingestein.
- AP3: Durchführung weiterer bilateraler Arbeitsgespräche und eines abschließenden KOLLORADO-e3 Projekttreffens mit den Partnern von FSU und KIT-INE. Dokumentation aller durchgeführten Arbeiten und Ergebnisse.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Technische Universität Bergakademie Freiberg, Akademiestr. 6, 09599 Freiberg		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11769A</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: MgO-Spritzbeton für Streckenverschlüsse für HAW-Endlager im Steinsalz (MgO-S3), Teilprojekt A		
<b>Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit</b> Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte, Feld: 2.3		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.05.2019 bis 31.03.2022	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2022 bis 31.03.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 1.518.723,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Gruner	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP1: Die Arbeiten sind abgeschlossen.
- AP2: In der Bohrung B31 im Bauwerk des In-situ-Spritzversuches GSBV-4 wurde im Zeitraum 15.03.2022 bis 05.05.2022 eine In-situ-Lösungspermeabilität zwischen  $2 \cdot 10^{-19} \text{ m}^2$  und  $8 \cdot 10^{-19} \text{ m}^2$  gemessen. Der Lösungsdruck wurde von anfangs 0,13 MPa auf 0,26 MPa erhöht und dann konstant gehalten. Auf eine Messung der Lösungspermeabilität in der Bohrung B32 im GSBV-4 wurde verzichtet, da in dieser Bohrung der eingefüllte Lösungsspiegel schnell absank und eine Messung nicht möglich war. Dies passt zu der in der B32 im Bereich von Wegsamkeiten lokal gemessenen hohen Gaspermeabilität von  $1,3 \cdot 10^{-16} \text{ m}^2$  bis  $5,5 \cdot 10^{-15} \text{ m}^2$ .
- AP3: Die Lösungspermeabilität an Bohrkernen aus dem Spritzversuch GSBV-4 hat sich innerhalb von 115 Tagen von anfangs ca.  $10^{-21} \text{ m}^2$  auf  $<3 \cdot 10^{-22} \text{ m}^2$  verringert. Weiterhin wurde gleichzeitig ein Anstieg des Manteldruckes beobachtet. Die Ergebnisse belegen die bereits früher beobachtete Selbstabdichtung des MgO-Spritzbetons bei Lösungszutritt, der mit einer Verringerung des Porenraumes infolge sekundärer Reaktionen der 5-1-8-Bindemittelphase mit der Zutrittslösung einhergeht.
- AP4: Modellrechnungen mit der Geometrie eines zukünftigen In-situ-Bauwerkes (Querschnittfläche  $10,5 \text{ m}^2$ ) zeigen, dass die Temperatur beim Abbinden auf weniger als  $50 \text{ }^\circ\text{C}$  begrenzt werden kann, wenn die Schichtmächtigkeit auf ca. 15 cm bis 20 cm begrenzt wird. Allerdings hat sich gezeigt, dass sich bei einem MgO mit mittlerer Reaktivität die Lage des Temperaturmaximums zeitlich nach hinten verschiebt. Dadurch erhöht sich die Temperatur in der bereits gespritzten Schicht, wenn eine neue Schicht aufgebracht wird. Angestrebt wird eine Reaktivität, die schon nach weniger als 10 h zum Temperaturmaximum führt, so dass die gespritzte Schicht bis zur nächsten Arbeitsschicht (nach 24 h) bereits abkühlen kann. Im anderen Fall kann nicht täglich eine neue Schicht aufgebracht werden.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Projektende zum 31.03.2022.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

M. Gruner, I. Paschke, D. Freyer, J. Arendt, J. Aurich, W. Kudla, T. Popp: Grundlagen und technische Konzepte zum Einsatz von MgO-Baustoff für Schacht- und Streckenverschlüsse im Salzbergbau – Ergebnisse aktueller Forschungsarbeiten in der Grube Teutschenthal. Vortrag zum 50. Geomechanik-Kolloquium 20. Mai 2022 in Sondershausen, Tagungsband - IfG Leipzig

J. Arendt, D. Freyer, M. Gruner, W. Kudla: Development of magnesia shotcrete with hard stone and salt surcharge. DAEF 2022 - 3rd Conference on Key Topics in Deep Geological Disposal. Challenges of a Site Selection Process: Society – Procedures – Safety. S9-03. 06 July 2022

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e. V., Bautzner Landstr. 400, 01328 Dresden		<b>Förderkennzeichen:</b>  <b>02 E 11769B</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: MgO-Spritzbeton für Streckenverschlüsse für HAW-Endlager im Steinsalz (MgO-S3), Teilprojekt B		
<b>Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit</b> Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte, Feld: 2.3		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.05.2019 bis 31.07.2022	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2022 bis 30.06.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 168.309,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Kulenkampff	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

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

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP1: Selektiver Rückbau des Funktionsbauwerkes GV2.

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

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

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

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

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

AP1/3: PET/ $\mu$ CT-Injektionsexperiment unter Einspanndruck.  $\mu$ CT-Untersuchungen an weiteren Bohrkernen.

AP4: Zuarbeit zum gemeinsamen Abschlussbericht.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

AP4: Abschlussbericht des Teilprojektes.

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

J. Kulenkampff: Direct tomographic observation of brine percolation into MgO shotcrete material, in: The Mechanical Behavior of Salt X - Proceedings of the 10th Conference on the Mechanical Behavior of Salt (SaltMech X) (ed. J.H.P. Bresser et al.), Utrecht, The Netherlands, 06-08 July 2022, doi.org/10.1201/9781003295808, CRC Press, London, 98-106

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Bundesanstalt für Materialforschung und –prüfung (BAM), Unter den Eichen 87, 12205 Berlin		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11779</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> MgO-Spritzbeton für Streckenverschlüsse für HAW-Endlager im Steinsalz, Qualitätssicherung mit Ultraschall (MgO-S3)		
<b>Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit</b> Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte, Feld: 2.3		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.05.2019 bis 31.03.2022	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2022 bis 31.03.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 31.864,46 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Niederleithinger	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Dieses Vorhaben wird in Nachfolge des Vorhabens „MgO-Spritzbeton: Verhalten bei Angriff von MgCl<sub>2</sub>-Lösung (MgO-SEAL)“ (Förderkennzeichen: 02E11435, 01.10.2015 - 30.04.2019) und im Verbund mit „Verbundprojekt: MgO-Spritzbeton für Streckenverschlüsse für HAW-Endlager im Steinsalz (MgO-S3), Teilprojekt A“ (Förderkennzeichen: 02E11769A) durchgeführt.

Das Verbundvorhaben soll belegen, dass beim Angriff von MgCl<sub>2</sub>-haltiger gesättigter NaCl-Lösung auf dem MgO-Spritzbeton, die Phasenumwandlung der 5-1-8-Phase in die thermodynamisch stabile 3-1-8-Phase zu einer Reduzierung der Permeabilität führt. Dazu sollen Proben aus dem MgO-Spritzbeton untersucht werden, die ausreichend lange unter Einwirkung der Lösung standen. Diese Proben sollen sowohl aus den Langzeitbohrlochversuchen im MgO-Spritzbetonbauwerk GV2 als auch durch dessen partiellen Rückbau gewonnen werden.

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

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Die BAM hat Anteile in folgenden Arbeitspaketen des Verbundprojekts

AP1: Selektiver Rückbau des Funktionsbauwerkes GV2

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

AP3: Laboruntersuchungen zur Vervollständigung der Datenbasis für MgO-Spritzbeton

AP3.7: Materialcharakterisierung durch US-Anwendungen

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

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

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

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

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

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

Im Q1/2022 wurde die Messdaten des finalen Versuchs detailliert ausgewertet. Das Ergebnis war nur partiell zufriedenstellend. Nur ein Teil der eingebauten Fehlstellen konnte per Ultraschallmessung identifiziert werden. Dafür wurde eine größere, nicht beabsichtigte Schichtablösung – also eine realistische Fehlstelle – sicher identifiziert und durch Bohrung bestätigt.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Die Arbeiten sind abgeschlossen. Der ausführliche Abschlussbericht liegt dem Konsortialführer vor und wird noch im Q3/2022 dem Projektträger übergeben.

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

Auf der Fachtagung NDT-CE 2022 (August 2022, Zürich) wurde zu den Ergebnissen des Teilprojekts ein Vortrag gehalten und gemeinsam mit den Partnern der TU BA Freiberg das zugehörige Manuskript veröffentlicht:

Vera Lay, Ute Effner, Ernst Niederleithinger, Jennifer Arendt, Wolfram Kudla : Ultrasonic quality assurance for underground salt shotcrete sealing structures in Teutschenthal mine, Germany. <https://www.ndt.net/search/docs.php3?id=27209>

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Kaiserstr. 12, 76131 Karlsruhe		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11799A</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Vertikales hydraulisches Dichtsystem nach dem Sandwich-Prinzip - Hauptprojekt (SANDWICH-HP), Teilprojekt A		
<b>Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit</b> Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte, Feld: 2.3		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.07.2019 bis 30.06.2023	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2022 bis 30.06.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 2.876.223,90 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Emmerich	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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



### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP1: Der Testplan für Schacht 2 wurde im Entwurf erstellt. QM Maßnahmen für die ES und DS Materialien wurden spezifiziert.
- AP2: Siehe Projektstatusbericht der GRS zu 02 E 11799B.
- AP4: Der Aufbau des Dichtsysteams mit Secursol MHP1 (70/30) in den untersten beiden DS und Calcigel in den oberen beiden DS sowie das geometrische Verhältnis der DS:ES (80 cm:30 cm) wurde festgelegt und die Instrumentierung geplant. Zur Beobachtung der Feuchteausbreitung werden im Gegensatz zum Schacht 1 jeweils 4x2 parallele vertikale TAUPE TDR Sensoren nahe der Schachtwand und mit 10 cm Abstand im Verschluss ein-geplant. Das Design der Druckkammer wurde an die Anschnittgeometrie des Feedingbohr-lochs angepasst.
- AP5: Siehe Projektstatusbericht der GRS zu 02 E 11799B.
- AP6: Der HTV-8 wurde planmäßig beendet. siehe Projektstatusbericht TUBAF zu 02 E 11799C. Die Planung des HTV-9 mit der Materialfolge wie im Schacht 2 wurde durchgeführt. Die MiniSandwichversuche Oe11 & Oe12 mussten aufgrund einer Undichtigkeit abgebro-chen werden. Die Versuche Oe5 & Oe6 wurden nach 1727 d beendet. Alle Versuche wur-den für mineralogische Untersuchungen beprobt. Bei den Versuchen Oe13 & Oe14 wurde nach 370 bzw. 430 Tagen ein Fluiddurchbruch beobachtet. Erste Quelldruck-Sättigungs-kurven für Calcigel (2W) mit deionisiertem Wasser wurden bestimmt. Die Saugspannungs-kurve für Secursol MHP1 wurde ermittelt.
- AP7: Siehe Projektstatusbericht des GRS zu 02 E 11799B.
- AP8: Der Datenbericht zur mineralogischen Charakterisierung des Opalinustons wurde erstellt. Gemeinsame Poster, Vorträge und Publikationen mit GRS, TUBAF und weiteren Projekt-beteiligten wurden erstellt.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1: Fertigstellung des Testplans für Schacht 2
- AP4: Einbau Sandwichverschlussystem Schacht 2 (3.-4. Quartal 2022)
- AP5: Fortsetzung Aufsättigung und Monitoring Sandwichverschlussystem Schacht 1
- AP6: Einbau und Start des HTV-9; Fortsetzung MiniSandwichversuche (Wdh. Tests Oe7 & Oe8 sowie Oe11 & Oe12) und Quelldruckmessungen (Calcigel 2W und 1W, Pearson Wasser)
- AP7: Evaluierung und Bereitstellung Labordaten zur Parametrisierung der ES und DS Materia-lien
- AP8: Bericht zu HTV-8 gemeinsam mit TUBAF; Vorbereitung weiterer Veröffentlichungen

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

- Emmerich, K. et al. (2022): The Sandwich sealing system: Scale transition from laboratory to a large-scale in-situ experiment at the Mont Terri rock laboratory
- Schellhorn, M. et al. (2022): Usage of Westerwald bentonites for high swelling pressure sealing in underground mining and nuclear waste deposits. Beide: 8th International Conference: Clays in Natural and Engineered Barriers for Radioactive Waste Confinement, Nancy, France
- Gemeinsame Veröffentlichungen siehe auch Projektstatusbericht der GRS und TUBAF zum För-derkennzeichen 02 E 11799B/C

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11799B</b>	
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Vertikales hydraulisches Dichtsystem nach dem Sandwich-Prinzip - Hauptprojekt (SANDWICH-HP), Teilprojekt B			
<b>Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit</b> Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte, Feld: 2.3			
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.07.2019 bis 30.06.2023		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2022 bis 30.06.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 1.453.730,00 EUR		<b>Projektleiter:</b> Wieczorek	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP1: Der Testplan für die Installation von Schacht 2 inklusive der kompletten Instrumentierung wurde im Entwurf erstellt.
- 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. 0.3 MPa angestiegen, die Radialspannung (bezogen auf Schacht 1) um 0.3 – 0.7 MPa.
- AP3: Zur Charakterisierung der EDZ um Schacht 2 wurden von BGR Oberflächenpackermessungen zur Permeabilitätsbestimmung durchgeführt, die Auswertung steht noch aus.
- AP4: Siehe Projektstatusbericht des KIT zu 02 E 11799A.
- AP5: Im Berichtszeitraum wurde die Aufsättigung des Dichtsystems in Schacht 1 planmäßig und ohne unerwartete Ereignisse fortgesetzt. Am 01. Juni wurde vom Niederdruck- auf den Hochdruck-Injektionsstank umgestellt. Der Injektionsdruck beträgt zurzeit ca. 10.8 bar, die Injektionsrate 0.46 l/d. Das Dichtsystem ist im Inneren weitgehend ungesättigt, die Aufsättigung geschieht teilweise über die Konturzone, wie die ERT-Messungen zeigen. Spannungsmessungen an der Schachtkontur zeigen Werte um 1.5 MPa (DS1), 0.6-0.7 MPa (DS2) bzw. 0.5 MPa (DS3 und DS4).
- AP6: Siehe Projektstatusbericht des KIT zu 02 E 11799A.
- AP7: Modellierungsarbeiten werden in der zweiten Jahreshälfte 2022 weitergeführt.
- AP8: Das Projekt wurde mit mehreren Postern beim virtuellen Mont Terri Technical Meeting im Januar vorgestellt, außerdem beim Beacon-Abschlussworkshop in London im Mai sowie mit einem Vortrag und vier Postern bei der internationalen Clay Conference in Nancy im Juni.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1: Fertigstellung des Testplans für Schacht 2
- AP2: Installation weiterer Minipiezometer nahe Schacht 2 (Anfang 2023)
- AP4: Einbau Sandwichverschlussystem Schacht 2 (3.-4. Quartal 2022)
- AP5: Weiterführung von Aufsättigung und Monitoring des Verschlussystems in Schacht 1
- AP7: Fortsetzung der Modellkalibrierung und der hydraulisch-mechanischen Simulationen

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Wieczorek, K. et al. (2022): Vertical hydraulic Sandwich sealing system: A large-scale in-situ experiment performed at the Mont Terri rock laboratory. 8th Int. Conference: Clays in Natural and Engineered Barriers for Radioactive Waste Confinement, Nancy, 13-16 June 2022

Hesser, J. et al. (2022): Monitoring the rock mass response to processes in a vertical sandwich sealing system. 8th Int. Conference: Clays in Natural and Engineered Barriers for Radioactive Waste Confinement, Nancy, 13-16 June 2022

Wieczorek, K. et al. (2022): Interpretative HM simulation of a MiniSandwich experiment using different numerical codes. 8th Int. Conference: Clays in Natural and Engineered Barriers for Radioactive Waste Confinement, Nancy, 13-16 June 2022

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

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Technische Universität Bergakademie Freiberg, Akademiestr. 6, 09599 Freiberg		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11799C</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Vertikales hydraulisches Dichtsystem nach dem Sandwich-Prinzip - Hauptprojekt (SANDWICH-HP), Teilprojekt C		
<b>Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit</b> Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte, Feld: 2.3		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.09.2020 bis 31.12.2022	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2022 bis 30.06.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 199.115,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Gruner	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

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

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

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

AP6: Im halbtechnischen Versuch HTV-8 wurde ab 14.03.2022 der Flüssigkeitsdruck von 92 bar schrittweise entlastet. Die Entlastungsphase endete am 30.03.2022 bei einem Restdruck von 0,1 bar. Am 04.04.2022 wurde die Druckzelle geöffnet und mit dem Rückbau begonnen. Im Ergebnis des Rückbaus wurde durch Probenahme die Verteilung des Wassergehaltes und der Dichte im Gesamtsystem bestimmt. In Korrekturrechnungen wurden die unvermeidbaren Volumenänderungen der Schichten nach Abbau des Behälterdeckels in der integralen Dichte der einzelnen Segmente berücksichtigt. Weiterhin wurden Proben für Nachuntersuchungen an KIT-CMM übergeben.

Für die Vorbereitung des nächsten Versuches HTV-9 wurden die Sensoren geprüft und teilweise ersetzt.

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

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

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

AP6: Vorbereitung und Einbau des Versuches HTV-9.

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

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

J. Aurich, M. Gruner, W. Kudla, M. Hofmann, F. Königer, R. Schuhmann, K. Emmerich: Technikumsversuche zu Bentonitdichtungen mit Äquipotenzialsegmenten. Bergbau (2022), Nr. 6, S. 255 – 260

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11809A</b>	
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Weiterentwicklung von d <sup>3f++</sup> : Hydrogeologische Modellierung im regionalen Maßstab (HYMNE), Teilprojekt A			
<b>Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit</b> Bereich C3: Sicherheitsnachweis, Feld: 3.3			
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.07.2019 bis 31.12.2022		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2022 bis 30.06.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 1.175.210,00 EUR		<b>Projektleiter:</b> Schneider	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Mit d<sup>3f++</sup> steht ein Werkzeug zur Modellierung der thermohalinen Grundwasserströmung und des Radionuklidtransportes durch poröse und geklüftete Medien zur Verfügung, das seit 1995 im Rahmen der BMWi-geförderten Vorhaben GRUPRO, TRAPRO, E-DuR, A-DuR, H-DuR und GRUSS entwickelt wurde. Derzeit wird es im Rahmen der Projekte SUSE, SMILE, ANSICHT-II und go-CAM auf endlagerrelevante und weitere Fragestellungen angewendet. Ziel von HYMNE sind die Erweiterung und Verbesserung der Anwendbarkeit von d<sup>3f++</sup> auf Modelle mit freier Grundwasseroberfläche im Sedimentgestein und im Kristallin und eine Erhöhung der Prognosesicherheit. Teilziele sind die Erweiterung auf die Simulation der Grundwasserbewegung unter Permafrostbedingungen, eine Automatisierung der Modellkalibrierung, numerische Verbesserungen sowie Test und Anwendung des Codes. Die Bearbeitung erfolgt in Kooperation mit der Universität Frankfurt.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Folgende Arbeitspakete werden von der GRS bearbeitet:

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

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP1.1: Mit der Arbeit am Projektbericht wurde begonnen.
- AP1.2: Das Vorflutermodell wurde weiter vervollkommen. Verzweigungen und Einflüsse der Modellgeometrie wurden durch einen Masterstudenten am G-CSC erfolgreich realisiert.
- AP1.3: Die Implementierung eines Phasenfeldmodells als Voraussetzung für diese Arbeit ist am G-CSC erfolgt.
- AP1.4: Die Verknüpfung eines detaillierten Modells mit einem gröber strukturierten Regionalmodell wurde am Beispiel Kraví Hora teilweise automatisiert umgesetzt. Eine Verallgemeinerung ist in Arbeit.
- AP2: Formulierungen der relevanten Zustandsgleichungen für Temperaturen bis  $-20\text{ °C}$  und für Drücke bis zu  $1\text{ MPa}$  wurden zusammengestellt. Auf dieser Basis wurden auch weniger rechenintensive Formulierungen für den Temperaturbereich von  $-20\text{ °C}$  bis  $+20\text{ °C}$  hergeleitet. Der Vergleich der Formulierungen aus der Literatur wurde abgeschlossen und zeigte klar den Wert der stringenten eigenen Herleitung auf. Das mit dem COMSOL-Update im Dezember 2021 veröffentlichte Modell für den INTER-FROST Benchmarkfall TH2 wurde überprüft und für Kontrollrechnungen mit den neuen Zustandsgleichungen vorbereitet.
- AP4.1: Das Verschneiden der Deformationszonen zu einem in sich konsistenten Netzwerk wurde abgeschlossen. Zu Testzwecken wurde das Netzwerk zunächst in eine vereinfachte Modellgeometrie eingebaut.
- AP4.2: Das Rechengitter für das Kraví Hora-Modell wurde erfolgreich aufgebaut (s. AP1.4). Es besteht aus 55 Schichten. Die Vorfluter und die räumlich veränderlichen Eingabedaten für Grundwasserneubildung und Permeabilitäten (je Schicht) wurden in das Modell integriert und erste Rechnungen durchgeführt.
- AP4.3: Die Arbeiten wurden abgeschlossen.
- AP5: Ein Fehler in der Parallelisierung des ILU-Glätters, der in Verbindung mit der Levelsetmethode auftrat, wurde lokalisiert und behoben. Das Levelsetverfahren wurde für großflächige freie Oberflächen stabilisiert. Wegen eines Memory-Leaks stieg der Speicherbedarf während mancher Simulationen mit der Zeit stark an. Das Problem wurde analysiert und behoben. Weiterhin wurde Unterstützung bei numerischen Problemen geleistet.
- AP6: Am 16.07. und am 03.12.2021 fanden Projektgespräche mit allen Projektpartnern als Videokonferenzen statt.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1.2: Die Implementierung wird abgeschlossen.
- AP1.3: Das Phasenfeldmodell wird für Kluftgestein umgesetzt.
- AP1.4: Die Verknüpfung von Modellen in ProMesh wird abgeschlossen.
- AP2: Veröffentlichung des geplanten Berichts über die theoretischen Grundlagen für die Modellierung der Grundwasserströmung unter Permafrostbedingungen.
- AP4.1: Integration des Kluftnetzwerkes in das SDM-Regionalmodell, endgültige Rechnungen
- AP4.2: Integration der räumlich veränderlichen Porositäten, Codevergleich
- AP6: Erstellung des Abschlussberichtes

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Johann Wolfgang Goethe-Universität Frankfurt am Main, Theodor-W.-Adorno-Platz 1, 60323 Frankfurt am Main		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11809B</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Weiterentwicklung von d <sup>3f++</sup> : Hydrogeologische Modellierung im regionalen Maßstab (HYMNE), Teilprojekt B		
<b>Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit</b> Bereich C3: Sicherheitsnachweis, Feld: 3.3		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2019 bis 30.09.2022	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2022 bis 30.06.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 957.067,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Lemke	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

Die Ergebnisse werden zusammen mit den Projektpartnern verwertet. Die große Nutzergemeinde des Simulationssystems UG ist eine ausgezeichnete Plattform zur Verbreitung und Verwertung der Projektergebnisse. Es erfolgt eine Zusammenarbeit mit der Gesellschaft für Reaktorsicherheit (GRS), Braunschweig, und der Firma TechSim, Kieselbronn, als Unterauftragnehmerin der GRS.

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

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

- AP1: Erweiterung der Anwendbarkeit (Kalibrierung, Kopplung mit Vorflutern, Zusammenspiel freie Oberfläche – Kluffgestein, technische Verbesserungen)
- AP2: Grundwasserbewegung unter Permafrostbedingungen
- AP3.1: Verbesserung der Robustheit der Löser durch hybride AMG-GMG Kombination
- AP3.2: Softwareintegration und Neustrukturierung
- AP3.3: Entwicklung und Implementierung eines voll-gekoppelten VOF-Verfahrens
- AP4: Anwendungsrechnungen (Äspö site descriptive model, Kraví Hora, INTERFROST)



### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP1: Für die Flexibilität der Darstellung des Modellgebiets wurde die Möglichkeit implementiert, die hydrogeologischen Parameter direkt in Geometriefiles zu speichern. Diese Option ermöglicht, die Modellgeometrien aus anderen Fileformaten in ProMesh3d zu laden und für die Benutzung in ug4 vorzubereiten.
- AP2: Mit der bestehenden Implementierung konnten zwei Testfälle aus dem Interfrost Benchmark (TH2 und TH3) erfolgreich getestet und abgeschlossen werden (Möller, 2022). Dazu wurde eine neue Form der Randbedingung implementiert. Für einen direkten Modellvergleich wurde zudem ein Retardierungsterm eingebaut, welcher auf theoretischer Ebene einen direkten Modellvergleich mit der ursprünglichen Arbeit (Grenier et al., 2019) erlaubt. Die durchgeführten Tests zeigten, dass bei der Wahl der Norm für die Schrittweitensteuerung Optimierungspotential besteht. Mit der verwendeten L2-Norm für die Temperatur treten an der Übergangsfläche zwischen Eis und Wasser vereinzelt Druckspitzen auf. Diese sind physikalisch nicht sinnvoll. Zwar werden diese nachfolgend geglättet, allerdings werden hierfür innerhalb der automatischen Schrittweitensteuerung sehr kleine Zeitschritte erforderlich.
- AP3.1: Die Arbeiten wurden fortgesetzt. Insbesondere wurde an den Ordnungsalgorithmen für konvektionsdominierte Gleichungen weitergearbeitet.
- AP3.2: Die Arbeiten wurden fortgesetzt. Weite Teile des LUA-Codes können nun bei Bedarf durch äquivalenten C++ ersetzt werden.
- AP3.3: Die Arbeiten an der Phasenfeldmodellierung mittels eines van Genuchten-Ansatzes zur Beschreibung der Grundwasseroberfläche wurden fortgesetzt. Das Modell unterstützt nun unter anderem Quellen und Senken, die sowohl in 2D als auch in 3D erfolgreich getestet wurden (Conen, 2022). Mit den jüngsten Modellerweiterungen ist es ferner auch möglich, Transportprozesse, wie sie z.B. für den Radionuklidtransport benötigt werden, zu rechnen. Vergleiche mit dem bestehenden Levelset-Verfahren wurden anhand des Henry-Problems durchgeführt. Die Ergebnisse sind qualitativ vergleichbar. Beim quantitativen Vergleich ergab sich, dass das van Genuchten-Modell eine feingranuläre Parametrisierung erfordert als der Levelset-Ansatz. In zukünftigen Arbeiten soll mit einem Labor-Experiment (Stöckl, 2016) verglichen werden.
- AP4: Beim Sandalermäns-Nawak Problem wird dichtegetriebener Grundwasserfluss mit einer phreatischen Oberfläche in Aquifern mit komplizierten Geometrien simuliert. Dabei gab es das Problem, dass der Speicher sehr schnell anwuchs. Das Problem wurde quantifiziert. Dadurch wurde es möglich den Speicherzuwachs abzustellen, so dass jetzt Langzeitsimulationen möglich sind. Im Fall des Kravi Hora Problems bestand die Notwendigkeit, ein Finite Elemente(FE)-Rechengitter basierend auf zwei verschiedenen Schichtmodellen zu erzeugen. Es handelt sich hierbei um eine grob aufgelöste äußere Regional-Schichtgeometrie mit einem Loch in der Mitte, welches wiederum durch eine fein aufgelöste Innenschichtgeometrie beschrieben wurde. Die Mischung dieser beiden Schichtgeometrien war mit den bisher vorhandenen ProMesh Scripting basierten Programmen nicht möglich. Deswegen wurde die Raster Layer Methode von ProMesh erweitert, und ein neues ProMesh Skript erstellt, welches voll automatisiert die inneren und die äußeren Schichten in ein monolithisches FE-Gitter mit beliebiger Feinheit transformiert. Es gab hierbei einige technische Herausforderungen, auf welche hier nicht im Detail eingegangen werden kann. Auf dem Kravi Hora FE-Gitter wurden bereits verschiedene Simulationen durchgeführt.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Die Arbeiten werden entsprechend der im Antrag angegebenen Vorgehensweise fortgesetzt.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Im Berichtszeitraum wurden folgende Bachelor-Arbeiten abgeschlossen:

Patrik Möller: Modellierung und Simulation thermohydraulischer Strömungen (Informatik, Bachelor, GU Frankfurt, 2022)

Niklas Conen: Simulation dichtegetriebener Strömungen in ungesättigten porösen Medien (Informatik, Bachelor, GU Frankfurt, 2022)

Niklas Conen: Hydrobiochemische Modellierung des Stickstoffeintrags durch landwirtschaftliche Nutzflächen in Regionen mit Trinkwasserbrunnen (Bioinformatik, Bachelor, GU Frankfurt, 2022)

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11819</b>	
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Mineralumwandlung und Sorption bei erhöhten Temperaturen in geklüfteten Kristallingesteinen und Barrierematerial (MUSE)			
<b>Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit</b> Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte, Feld: 2.3			
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.08.2019 bis 31.07.2022		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2022 bis 30.06.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 1.736.012,50 EUR		<b>Projektleiter:</b> Dr. Flügge	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Bei der Durchführung des Vorhabens werden folgende Arbeitspakete bearbeitet:

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

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1: Übertragbarkeit der normierten Verteilungskoeffizienten:

Die Versuchsdurchführung wurde dahingehend angepasst, dass es zwecks eines verbesserten Verständnisses der Rückhaltung der Spurenelemente im Kluftmaterial und Gestein die Liste der Elemente und Elementisotope, die mit der ICP-MS/MS-Methode bestimmt werden, erweitert wurde. Auch für die bisher erfassten Elemente wurde das Messprotokoll entsprechend den aktuellen Entwicklungen in dem erst in den letzten Jahren etablierten ICP-MS/MS-Messverfahren angepasst. Die ICP-MS/MS-Messungen nehmen dementsprechend mehr Zeit in Anspruch als ursprünglich für die einfache ICP-MS-Methode veranschlagt, dafür wird aber ein besseres Prozessverständnis der Rückhaltung der Spurenelemente ermöglicht. Die ICP-OES-, ICP-MS/MS- und TOC-Messungen der Granite-458 m und -954 m vom URL KURT (Südkorea) wurden abgeschlossen.

Bei der Durchführung der Versuche bei 80 °C wurde eine optimierte Probenahme konzipiert. In den ersten Versuchen mit vier Kernproben wurde die Lösung aus einem Auslaugungsbatch, welches in einem Glasgefäß mit Schraubverschluss ablief, erst nach einer Abkühlung auf die handhabbare Temperatur von etwa 40 °C dekantiert. Die Abkühlung kann allerdings zu einer teilweisen Präzipitation/Resorption der ausgelaugten Stoffe führen. Für eine Probenahme ohne vorherige Abkühlung wird nun angestrebt, ein Glasreaktor zu verwenden, welcher in einem Ölbad auf Heizrührplatten auf der Zieltemperatur bleibt und über einen Septum-Eingang für die Probenahme verfügt. Die Probenahme selbst soll mit einem Spritzfilter erfolgen. Diese Vorgehensweise soll im nächsten Halbjahr implementiert werden.

AP2: Einfluss von erhöhten Temperaturen auf die Stabilität von Kluftfüllungen:

Hydrothermale Versuche bei 120 °C mit den fünf vor dem Pandemieausbruch erhaltenen Proben aus Russland wurden abgeschlossen. Die Charakterisierung und Präparation der tschechischen und südkoreanischen Kernproben wurden an der TU Darmstadt gestartet.

AP3: Einfluss von erhöhten Temperaturen auf die Stabilität von Bentoniten:

Die Versuchsreihe aus 30 Versuchen bei 120 °C mit den vom IREM RAN an die GRS übergebenen vier Bentoniten wird beendet. Derzeit laufen die Gasprobenahmen und -analysen.

AP4: Dokumentation und Projektleitung:

Kommunikation mit IREM RAN (Russland, bis zum Kriegsausbruch), SÚRAO (Tschechien) und der TU Darmstadt als Unterauftragnehmer.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

AP1: Fortsetzung der Auslaugungsversuche. Vollaufschluss der Ausgangsproben mit der Tetrafluoroborsäure. Durchführung und Auswertung der ICP-MS-, ICP-OES-, TOC- und BET-Messungen.

AP2: Beginn der Versuche mit Kristallinproben vom URL Bukov und URL KURT.

AP3: Abschluss der 1. Versuchsreihe mit den vier für das russische Endlagerprogramm relevanten Bentoniten. Start der 2. Versuchsreihe mit dem tschechischen Bentonit.

AP4: Durchführung der Abstimmungen mit Partnern der TU Darmstadt zu Untersuchungen der Kristallinproben aus Tschechien und Südkorea.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11829</b>	
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Tonsteinforschung im Felslabor Mont Terri ab Phase 25 (MonTe-25)			
<b>Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit</b> Bereich C1: Standortauswahl, Feld: 1.2			
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.07.2019 bis 31.12.2022		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2022 bis 30.06.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 1.026.220,00 EUR		<b>Projektleiter:</b> Dr. Czaikowski	

### 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Als Partner im Betreiber-Konsortium führt die GRS seit 1999 im Auftrag des BMWi Forschungsarbeiten im schweizerischen Untertagelabor Mont Terri im Opalinuston durch.

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

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

### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP1: Die GRS verwendet für die Modellierung den FEM-Code CODE\_BRIGHT. Die Modellierungsarbeiten werden simultan zu dem Vorgehen im internationalen Projekt DECOVALEX 2023 mit steigender Komplexität durchgeführt. Begonnen wurde mit einem 2-dimensionalen Model und stufenweisem Aufbau zu einer vollen THM-Kopplung.

Des Weiteren wurde die Modellgeometrie auf ein 3-dimensionales Modell erweitert, welches aktuell bearbeitet wird. Hier bestehen aktuell noch Diskrepanzen zwischen den Partnern und den Temperaturmesswerten.

- AP2: Die Messungen wurden fortgeführt, die Messwerte zeigen die Tendenz der Vorjahre. Ein für das 1. HJ vorgesehenes Treffen der Experimentpartner, bei dem die weitere Vorgehensweise (Abkühlung und Rückbau) festgelegt werden sollen, wurde auf September 2022 verschoben.
- AP3: Die Messungen wurden fortgeführt, die Messwerte zeigen eine deutliche Reaktion auf die Streckenerweiterung durch Zunahme der Porendrücke und Temperaturwerte.
- AP9: Im CD-A Experiment wird der Einfluss der Bewetterung auf das hydraulisch-mechanische Verhalten des Opalinustons durch Vergleich der Umgebung einer bewetterten und einer abgeschlossenen Nische überwacht, wobei GRS die Porendruckmessungen im Gebirge übernimmt. Unterschiede im Porendruck 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. Hierzu wurden auf der ClayConference 2022 Ergebnisse von der Projektkoordinatorin vorgestellt.
- AP10: Teilnahme an den Steering Meetings im 1. Hj.

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

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

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

Im Rahmen der ClayConference 2022 wurden die Modellierungsarbeiten zu dem CD-A und dem MB-A Experiment als Poster vorgestellt. Außerdem gab es einen Vortrag zu dem CD-A Experiment von der Projektkoordinatorin Gesa Ziefle (BGR).

<b>Auftragnehmer:</b> BGE Technology GmbH, Eschenstr. 55, 31224 Peine		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11839</b>	
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Entwicklung eines Leitfadens zur Auslegung und zum Nachweis von geotechnischen Barrieren für ein HAW Endlager in Salzformationen (RANGERS)			
<b>Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit</b> Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte, Feld: 2.3			
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2019 bis 31.12.2022		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2022 bis 30.06.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 412.889,06 EUR		<b>Projektleiter:</b> Simo	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP4: Die im letzten Berichtszeitraum begonnenen thermischen Berechnungen wurden hinsichtlich der thermischen Belastungen der geotechnischen Barrieren ausgewertet. Dies wurde als Teilnachweis zur geochemischen Stabilität durchgeführt, damit die Grenztemperatur der Komponenten nicht überschritten wird. Während im Einlagerungsbereich ein Temperaturmaximum von 130 °C erreicht wird, erhöht sich die Temperatur im Bereich der Streckenverschlüsse um ca. 20 °C. Entlang des Schachtverschlusses ist mit einer Erhöhung der Temperatur von ca. 5 °C zu rechnen.

Die Berechnungen zur Kompaktion des Salzgruses in den Versatzbereichen des Endlagerbergwerkes wurden weitergeführt. Diese Berechnungen werden als Grundlage für die hydraulischen Nachweise benötigt und fließen als Eingangsparameter in die PA-Simulationen bei SANDIA. Entwicklungsarbeiten in dem Code PFLOTRAN wurden von dem amerikanischen Partner durchgeführt, um die Porositätsdaten im Modell kommend aus der thermomechanischen Simulation als Inputparameter in PFLOTRAN zu nutzen. Mithilfe dieser Daten lässt sich anschließend in PFLOTRAN die Permeabilität über die Zeit in den Versatzbereichen errechnen. Über diesen Weg wird eine implizite Kopplung zwischen der mechanischen Simulation in FLAC3D und der TH<sup>2</sup>C-Berechnungen in PFLOTRAN realisiert.

Aufgrund von Unterschieden in den thermischen Ergebnissen, die mit FLAC3D und PFLORAN am gleichen Modell ermitteln wurden, wurde ein Code-Benchmark durchgeführt. Nach mehreren Iterationen konnte schlussendlich festgestellt werden, dass die Porosität des Versatzes in PFLOTRAN die thermische Entwicklung im Modell zweierlei beeinflusst. Zum einen führt die Porosität zu einer erhöhten Konvektion im Modell. Zum anderen ändert die Porosität die Wärmekapazität des porösen Mediums bestehend aus Feuchtigkeit, Gas und Salzgrus. Dies erklärt den Unterschied zu den FLAC3D-Ergebnissen, bei denen nur die Wärmeleitung und einer einzigen Phase (Festphase) betrachtet werden. Mit dieser Erkenntnis, werden im nächsten Schritt die PA-Simulationen am Gesamtmodell fortgeführt.

Im Berichtszeitraum wurde für den Nachweis der geochemischen Stabilität orientierende chemische Berechnungen von dem amerikanischen Partner durchgeführt. Ziel der Untersuchung war es, die chemische Zusammensetzung der Lauge im Schacht durch Reaktion mit den unterschiedlichen geologischen Schichten zu ermitteln. Die Ergebnisse zeigen eine Anreicherung von Mg-Ionen während Wasserinfiltration im Schacht. Dies deutet auf eine günstige chemische Zusammensetzung der Lauge im Kontakt mit den MgO-Dichteelementen, die im Schacht installiert sind. Die Korrosion des MgO-Betons kann somit ausgeschlossen werden.

Die Diskretisierung der Strecken im Grundmodell musste aufgrund der Größe des Modells (3,5 Mio. Elemente) und dessen Dimensionen (mehrere km in jeder Richtung) angepasst werden. Um der Einfluss der Netzdichte auf die Ergebnisse der thermomechanische Kompaktion abzuschätzen, wurde eine Sensitivitätsanalyse über wenige Jahre durchgeführt. Die Ergebnisse zeigen, dass sowohl der Vernetzungsdichte als auch das Wachstum der Elementgröße vom Einlagerungsbereich bis ins Gebirge einen Einfluss auf die Ergebnisse haben. Mit diesen Erkenntnissen soll das Grundmodell für weitere Berechnungen optimiert werden.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

AP4: Die Teilnachweise gemäß Modellierungskonzept werden weitergeführt. Schwerpunkt wird auf die thermo-mechanischen Berechnungen für den Schacht- und Streckenverschluss gelegt. Parallel werden die Kompaktionsberechnungen weitergeführt. Der Projektpartner Sandia wird nach Fertigstellung der Entwicklungsarbeiten die PA-Simulationen weiterführen.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Helmholtz-Zentrum für Umweltforschung GmbH – UFZ -, Permoserstr. 15, 04318 Leipzig		<b>Förderkennzeichen:</b>  <b>02 E 11850A</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Deutsch-chinesische Entsorgungsforschung – Pilotprojekt: Reanalysis of BRIUG THM Mock-up Test (ELF-China-Pilot), Teilprojekt A		
<b>Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit</b> Bereich C3: Sicherheitsnachweis, Feld: 3.1		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.08.2020 bis 31.08.2022	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2022 bis 30.06.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 69.990,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Shao	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Das Verbundforschungsprojekt besteht aus den folgenden Arbeitspaketen (AP):

- AP1: Projektmanagement
- AP2: Systemanalyse (Modellierung)
  - AP2.1: TH<sup>2</sup>M-Prozessmodellentwicklung
  - AP2.2: RTM-Modellentwicklung (Reactive Transport Processes)
- AP3: Experimente
- AP4: Synthesis & Education

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



### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

#### AP1 Projektmanagement:

Nach interner Diskussion einigten sich alle Projektpartner darauf, eine kostenneutrale Verlängerung des ELF-China-Pilotprojekts um 6 Monate bis zum 31.08.2022 zu beantragen. Der verlängerte Zeitraum wird für die Parameterkalibrierung und Modellvergleiche genutzt. Der Antrag wurde im Januar an den Projektträger geschickt. Er war im März bewilligt.

#### AP2.2 RTM-Modellentwicklung:

Im Mai 2022 haben die UFZ-Kollegen ein RTM-Modell fertiggestellt, das die heterogene Diffusion von Kationen auf der Grundlage eines zweidimensionalen (2D) Strukturmodells simuliert. In dieser Studie werden die effektiven Diffusionskoeffizienten in verschiedenen Sedimentschichten auf der Grundlage des Up-Scaling-Workflows von der Poren- zur Kernskalensimulation in Kombination mit den mehrskaligen digitalen Gesteinsmodellen quantifiziert. Die Sensitivitätsanalyse konzentriert sich auf die Auswirkungen des Tonschichtwinkels und die Auswirkungen der verschiedenen Schichten, in denen der Kanister vergraben ist, auf die räumliche und zeitliche Entwicklung der Radionuklidfrontlinie. Weil die Lage des Kanisters und des Tunnels von chinesischer Seite noch nicht festgelegt wurde, simuliert das UFZ-Team das oben genannte Modell unter Verwendung der Geometrie und der chemischen Parameter der Opalinustonformation. Das Ergebnis dieser Studie hat Dr. Chaofan Chen auf der EGU-Konferenz 2022 vorgestellt. Er hat auch ein Manuskript mit einer Zusammenfassung dieser Arbeit bei der Zeitschrift „Advances in Geosciences“ eingereicht.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Nach dem Ende des Projekts im August 2022 ist eine Abschlussveranstaltung im Oktober/November 2022 geplant. Während des Treffens werden alle teilnehmenden Partner ihre Ergebnisse vorstellen.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Chen, C., Yuan, T., Lu, R., Fischer, C., Montoya, V., Kolditz, O. and Shao, H., 2022: The influence of sedimentary heterogeneity on the diffusion of radionuclides in the sandy facies of Opalinus Clay at the geological scale (No. EGU22-2343). Copernicus Meetings

Chen, C., Yuan, T., Lu, R., Fischer, C., Kolditz, O. and Shao, H., 2022: The influence of sedimentary heterogeneity on the diffusion of radionuclides in the sandy facies of Opalinus Clay in the field scale, *Advances in Geosciences* (Submitted)

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11850B</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Deutsch-chinesische Entsorgungsforschung – Pilotprojekt: Reanalysis of BRIUG THM Mock-up Test (ELF-China-Pilot), Teilprojekt B		
<b>Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit</b> Bereich C3: Sicherheitsnachweis, Feld: 3.1		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.08.2020 bis 31.08.2022	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2022 bis 30.06.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 25.000,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Czaikowski	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Das Pilotprojekt wird von allen Partnern in fünf Arbeitspaketen durchgeführt:

AP1: Projektmanagement

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

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

AP4: Synthese und Ausbildung

AP5: Sozial-technische Forschung

GRS ist an AP3 beteiligt.

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

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

- Die Wasseraufnahmefähigkeiten bzw. Wasserrückhaltbarkeiten der Bentonite wurden durch Messung von Wassergehalten der Proben bei unterschiedlichen Luftfeuchtigkeitswerten ermittelt.
- Ein Versuchssystem mit zehn Stahlzellen wurde zusammengebaut und getestet, um Quelldruck, Wasserpermeabilität und Gasdurchbruchdruck bzw. Gaspermeabilität von kompaktierten Bentoniten mit unterschiedlichen Dichten zu ermitteln. Vortests mit zehn Bentonit-Proben sind im Lauf.
- Teilnahme am Final Workshop of the EU Beacon project und der International Clay Conference mit Poster-Beiträge.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Erstellung des Abschlussberichts.

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

Chun-Liang Zhang and Yuemiao Liu: Hydro-mechanical properties of GMZ bentonite as buffer material, Poster presentation on Final Workshop of the Beacon project, 17-19 May 2022, London

Chun-Liang Zhang and Yuemiao Liu: Investigation of sealing performances of compacted bentonites GMZ and MX80, Poster presentation on the 8th Clay Conference in Nancy, 13-16 June 2022

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Technische Universität Bergakademie Freiberg, Akademiestr. 6, 09599 Freiberg		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11850C</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Deutsch-chinesische Entsorgungsforschung – Pilotprojekt: Reanalysis of BRIUG THM Mock-up Test (ELF-China-Pilot), Teilprojekt C		
<b>Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit</b> Bereich C3: Sicherheitsnachweis, Feld: 3.1		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.08.2020 bis 31.08.2022	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2022 bis 30.06.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 89.993,50 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Nagel	

### 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

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

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

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

Die folgenden Arbeiten wurden im Berichtszeitraum durchgeführt:

- Die bisher unter der Annahme der Rotationssymmetrie durchgeführten Analysen konnten aufgrund von Effizienzsteigerungen im Code auf dreidimensionale Modelle umgestellt werden. Dadurch kann nunmehr die hydraulische Randbedingung über die 4 um jeweils 90° in Umfangsrichtung versetzten Zuleitungen realistischer berücksichtigt werden. In den vorliegenden experimentellen Daten fällt dabei auf, dass die Position der Sensoren zwar in radialer und axialer, nicht jedoch in Umfangsrichtung dokumentiert ist. Eine Anfrage bei den chinesischen Partnern zur Klärung wurde gestellt.
- Als Ergebnis umfangreicher Detailanalysen zu den Randbedingungen erwies sich die explizite Berücksichtigung von Stahltank und Isolation als ein wesentliches Element auf dem Weg zur Reproduktion der Ergebnisse. Dabei kommt ein neu in OGS entwickeltes Feature zum Einsatz, das es erlaubt, die THM Prozessgleichungen auf unterschiedlichen Teilgebieten selektiv zu assemblieren. Somit werden die hydraulischen Feldgleichungen nur im Bereich des Bentonits gelöst und es wird vermieden, dass in angrenzenden nicht wasserführenden Materialbereichen Strömungseffekte mit unphysikalischen Parametersätzen unterbunden werden müssen.
- Die Arbeit an einer Publikation der Ergebnisse hat begonnen.

Die im Januar 2022 von der BGR Hannover abgeholten Bohrkern sind wie geplant konditioniert und entsprechend an die Kollegen der Uni Jena und der GRS Braunschweig versendet worden.

Hinsichtlich der Laboruntersuchungen zur Charakterisierung der Bohrkern dauern die Arbeiten aufgrund interner Verzögerungen derzeit noch an.

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

Folgende Arbeitsschritte sind für den folgenden Berichtszeitraum geplant:

- Weitere Präzisierung des Modellsetups und der experimentellen Daten im Austausch mit den chinesischen Partnern, um Lücken und Widersprüche in der publizierten Literatur zum Experiment zu schließen.
- Systematische Erfassung grundlegender Ungewissheiten in den Modellanalysen.
- Weiterführung und Beendigung der experimentellen Arbeiten anhand des Probenmaterials aus Beishan.

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

Eine Veröffentlichung in Form eines wissenschaftlichen Artikels befindet sich derzeit in der Vorbereitung.

Daneben wurden folgende Konferenzbeiträge veröffentlicht:

T. Nagel, T. Helfer, M. Pitz, D. Naumov, N. Grunwald, S. Kaiser, K. Yoshioka, O. Kolditz: Flexible integration of constitutive models into simulators for non-isothermal two-phase flow in deformable porous and fractured media. 11th European Solid Mechanics Conference. 04-08 July 2022, Galway, Ireland

A. A. Chaudhry, T. Nagel: Coupled THM modelling of China Mock-Up test using OpenGeo-Sys. Tage der Standortauswahl der Bundesgesellschaft für Endlagerung. 08-10 June, 2022, Aachen, Germany

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Technische Universität Clausthal, Adolph-Römer-Str. 2a, 38678 Clausthal-Zellerfeld		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11850D</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Deutsch-chinesische Entsorgungsforschung – Pilotprojekt: Reanalysis of BRIUG THM Mock-up Test (ELF-China-Pilot), Teilprojekt D		
<b>Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit</b> Bereich C3: Sicherheitsnachweis, Feld: 3.1		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.08.2020 bis 31.08.2022	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2022 bis 30.06.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 70.072,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Düsterloh	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

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

WP2:

Auswertung und Zusammenstellung aller im Projekt erhaltenen numerischen Simulationsergebnisse

WP3:

Auswertung und Zusammenstellung aller im Projekt erhaltenen laborativen Ergebnisse

WP5:

Fortführung Erstellung Schlussbericht

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

WP5:

Fertigstellung Schlussbericht

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

Beitrag: 'Geotechnical barriers made of bentonite for a repository in clay rock formations – Investigations for the verification and validation of a multi-physical constitutive model (Barcelona-Basic-Model) for bentonite as backfill and sealing material special regard to quality assurance' bei der Clay Conference, Nancy, Frankreich, 13.-16. Juni 2022

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Friedrich-Schiller-Universität Jena, Fürstengraben1, 07743 Jena		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11850E</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Deutsch-chinesische Entsorgungsforschung – Pilotprojekt: Reanalysis of BRIUG THM Mock-up Test (ELF-China-Pilot), Teilprojekt E		
<b>Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit</b> Bereich C3: Sicherheitsnachweis, Feld: 3.1		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.08.2020 bis 31.08.2022	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2022 bis 30.06.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 15.104,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Schäfer	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

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

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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



### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

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

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

Das experimentelle Setup zur Quantifizierung der Bentoniterosion unter glazialen Schmelzwasserbedingungen, hier natürliches und modifiziertes Grimsel Grundwasser (GGW), und dem Einfluss von akzessorischen Gemengteilen mit MX-80 Bentonit sind experimentell nahezu abgeschlossen (Aktivitäten im Projekt KOLLORADO-e<sup>3</sup>, Förderkennzeichen: 02E11759A). Insgesamt wurden fünf Experimente unter identen Versuchsbedingungen erfolgreich durchgeführt.

Durchschnittliche Erosionskonzentrationen von  $2.4E+09 \pm 8.2E+07$  bzw.  $2.2E+09 \pm 7.1E+07$  Partikeln pro mL konnten dabei für den eingesetzten GMZ-001 bzw. GMZ-24-200 Bentonit bestimmt werden. Als Ergänzung wurden im Berichtszeitraum aus rohem GMZ-001 Bentonit gewonnene Na-Montmorillonit-Proben mit unterschiedlichen Gemengteilen von akzessorischen Mineralen (Quarz, Gips) gemischt. Diese wurden dann mit GGW über einen Zeitraum von 77 Tagen in Kontakt gebracht. Bei einer ausschließlichen Zumischung von 10 Gew. % Quarz (SF800 Quarzmehl) kam es zu einer sichtbaren Erosion der Tonfraktion. Unter Verwendung von Quarz und Gips (AGR 40) konnte die Erosion im Fall von 2 Gew. % Gips zwar verlangsamt, jedoch nicht gestoppt werden. Bei einer Beimengung von 5 Gew. % Gips wiederum, wurden sowohl die Quelleigenschaft ( $r=7$  cm), als auch die Erosion des Materials reduziert.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Quantitative Analyse der gewonnenen partikelbezogenen (NTA) und nasschemischen Daten des aufgefangenen Probenwassers der letzten Versuchsreihe.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Hermann-von-Helmholtz-Platz 1, 76344 Eggenstein-Leopoldshafen		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11850F</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Deutsch-chinesische Entsorgungsforschung – Pilotprojekt: Reanalysis of BRIUG THM Mock-up Test (ELF-China-Pilot), Teilprojekt F		
<b>Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit</b> Bereich C3: Sicherheitsnachweis, Feld: 3.1		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.08.2020 bis 31.08.2022	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2022 bis 30.06.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 10.270,50 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Geckeis	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

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

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

#### AP3.2:

Diffusionsexperimente mit den konservativen Radiotraceren  $^{36}\text{Cl}^-$  und HTO (jeweils 1000 Bq/mL in den Eingangsreservoirs) wurden in zwei Zellen, die ein Magnetitpellet und kompaktierte GMZ Bentonitproben enthielten, nach Äquilibrierung mit einem synthetischen Granitwasser durchgeführt. Ziel war es, Veränderungen der Porosität und der Diffusionskoeffizienten im Laufe der Zeit zu untersuchen. Sowohl für  $^{36}\text{Cl}$  als auch für HTO wurde nach etwa 7 Tagen ein konstanter Fluss beobachtet, mit Werten von 35 bzw. 120  $\text{Bq} \cdot \text{d}^{-1} \cdot \text{cm}^{-2}$  für  $^{36}\text{Cl}$  und HTO. Der Diffusionskoeffizient wurde auf  $4,40 \cdot 10^{-11} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$  für  $^{36}\text{Cl}$  und auf  $1,52 \cdot 10^{-10} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$  für HTO geschätzt. Nach einem Ausdiffusionsschritt für den konservativen Radiotracer über einen Zeitraum von 100 Tagen wird die Diffusion der stark sorbierenden Tracer  $^{137}\text{Cs}(\text{I})$  und  $^{60}\text{Co}(\text{II})$  durch die Magnetit-Bentonit-Grenzfläche untersucht. Die Experimente werden unter Verwendung einer Aktivität von 10 kBq/mL von  $^{137}\text{Cs}(\text{I})$  oder  $^{60}\text{Co}(\text{II})$  im Eingangsreservoir jeder Zelle durchgeführt. Aus den Ausdiffusionsreservoirs wurden regelmäßig Proben entnommen und die Aktivitäten von  $^{137}\text{Cs}(\text{I})$  und  $^{60}\text{Co}(\text{II})$  durch Gamma-spektroskopie gemessen. Die Experimente sind noch nicht abgeschlossen.

Experimente zur Bentoniterosion mit einer Anordnung, bei der ein GMZ-Bentonitpellet (19 mm Durchmesser, 10 mm Höhe, Trockendichte  $1,6 \text{ g/cm}^3$ ) mit einer Edelfritze (Porenweite  $20 \mu\text{m}$ ) fixiert wird, erfolgten komplementär zu FSU Untersuchungen. Zwei GMZ-Bentonit-Pellets wurden in getrennten Kammern eines doppelseitigen Reaktors platziert. Die Erosion der GMZ wird untersucht, indem ein synthetisches Porenwasser aus Gansu Beishan 93 Tage lang mit einer Durchflussrate von  $3 \mu\text{L/min}$  in den doppelseitigen Reaktoren zirkuliert wird. Das Quellen der Bentonitpellets wurde durch die Filterplatten begrenzt und die Hydratation der Pellets war nach 3 Tagen abgeschlossen. Das Maximum der Tonauswaschung für den GMZ-Bentonit trat nach etwa 20 Tagen auf, während es bei rohem MX80 nach etwa 40 Tagen beobachtet wurde (siehe Bouby et al. 2020). Der durchschnittliche Wert der Massenverlustrate, integriert über 70 Tage Erosionszeit, wird für den GMZ-Bentonit auf  $0,069 \text{ kg/y/m}^2$  geschätzt, während er für rohen MX80 über 325 Tage bei  $0,043 \text{ kg/y/m}^2$  lag.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Die Experimente zum Diffusionsverhalten von Cs und Co werden weitergeführt bis ein konstanter Fluss von Radionukliden erreicht ist. Im Anschluss daran wird eine weitere Injektion konservativer Radionuklide vorgenommen und eine  $\mu\text{-CT}$  Untersuchung durchgeführt, um die Veränderungen der Porosität im Laufe der Zeit zu untersuchen. In einer Post-mortem-Analyse soll die Verteilung der Radionuklide an der Grenzfläche Bentonit/Magnetit quantifiziert werden. Bentoniterosionsexperimente werden weiter fortgesetzt. Auch hier erfolgt eine Charakterisierung der Bentonitproben nach Beendigung der Experimente.

Daten beider Experimente werden zusammengefasst und in einem Bericht vergleichend mit anderen Experimenten, die mit MX-80 Bentonit durchgeführt wurden, diskutiert.

#### Quellenangabe:

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

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Johannes Gutenberg-Universität Mainz, Saarstr. 21, 55122 Mainz		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11860A</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt A		
<b>Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit</b> Bereich C3: Sicherheitsnachweis, Feld: 3.1		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2020 bis 30.09.2023	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2022 bis 30.06.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 571.271,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Reich	

### 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Zur Untersuchung des Einflusses von Eisen auf die Sorption von Pu(IV) mussten weitere Experimente zur Charakterisierung und Optimierung der elektrochemischen Zelle (ECC) durchgeführt werden. Es wurde die Dauer bis zur Einstellung des Konzentrationsgleichgewichts zwischen den beiden Kammern der EEC bestimmt, die durch einen Filter aus Polyethersulfon getrennt sind. Zunächst wurde dieses Experiment in 0,2 %iger HCl durchgeführt. Bei einer  $^{55/56}\text{Fe(II)}$ -Konzentration

von  $1,0 \times 10^{-5}$  M war bei laufender Elektrolyse das Gleichgewicht zwischen beiden Kammern nach ca. 35 h erreicht. Bei der Wiederholung des Experiments in ACW-VGL (Zementporenwasser auf Basis der verdünnten Gipshuttlösung, pH = 12,5) war jedoch selbst nach 70 h kein Gleichgewicht zwischen beiden Kammern eingestellt. Außerdem hatte die Fe-Aktivität in der Elektrolytlösung stark abgenommen, was auf eine Ausfällung bzw. starke Wandsorption (78 %) in der Zelle zurückzuführen sein könnte. Für den Fall der Wandsorption wurde untersucht, ob eine Nachbehandlung der Oberfläche der ECC-Zelle vorteilhaft ist. Hierfür wurden jeweils zwei polierte PEEK- und PMMA-Stücke ( $\sim 26 \text{ mm} \times 21 \text{ mm} \times 11 \text{ mm}$ ) angefertigt und Sorptionsexperimente in VWR-Zentrifugenröhrchen (Polypropylen) in ACW-VGL durchgeführt. Dafür wurde eine niedrigere  $^{55/56}\text{Fe(III)}$ -Konzentration von  $8,0 \times 10^{-8}$  M gewählt. Diese Versuche ergaben insgesamt eine sehr geringe Fe-Sorption an den Wänden des VWR-Röhrchens und an den Probestücken aus PMMA und PEEK. Daraufhin wurde das Experiment in der ECC (ohne Membran und Elektroden) wiederholt; ebenfalls bei einer Konzentration von  $8,0 \times 10^{-8}$  M Fe in ACW-VGL. Aufgrund der geringen Fe-Konzentration verblieb dieses Mal 91 % der eingesetzten Fe-Aktivität in der flüssigen Phase. Daraus kann geschlussfolgert werden, dass eine Nachbehandlung der Oberfläche der ECC nicht notwendig ist und dass es bei dem Versuch mit  $1,0 \times 10^{-5}$  M Fe zu einer Ausfällung in der ECC gekommen war.

In einer filterfreien Diffusionszelle wurde nach zwei Jahren Lagerung (in ACW-VGL) unter Ar-Atmosphäre die Porosität des Zementsteines (HCP) mittels der HTO-Durchdiffusion ( $c(\text{HTO}) = 2,4 \times 10^{-9}$  M) in VGL (pH 8,2) überprüft. Dabei wurden veränderte Diffusionsparameter ( $D_e$  und  $\alpha$ ) bestimmt. Der  $D_e$ -Wert ist nur geringfügig angestiegen von  $(8,7 \pm 0,4) \times 10^{-12} \text{ m}^2/\text{s}$  auf  $(1,3 \pm 0,1) \times 10^{-11} \text{ m}^2/\text{s}$ . Der Parameter  $\alpha$  ist von  $(0,62 \pm 0,03)$  auf  $(0,91 \pm 0,04)$  stark angestiegen, was wahrscheinlich durch eine vergrößerte Porosität des Zementkerns infolge von Auslaugungsprozessen in dem Hintergrundelektrolyten VGL bedingt ist. Nach 90 Tagen war die Ausdiffusion von HTO beendet und die Eindiffusion von  $8,0 \times 10^{-6}$  M  $^{237}\text{Np(V)}$  in VGL unter Ar-Atmosphäre wurde begonnen. Während der Dauer der Diffusion von ca. 50 Tagen wurde die Konzentrationsabnahme des Np im Primärreservoir regelmäßig mittels Gammaskopie gemessen. Die Auswertung des Np-Eindiffusionsprofils mittels abrasiver Schleifmethode steht noch aus.

In einer zweiten filterfreien Diffusionszelle ist die Charakterisierung des Zementkerns mittels HTO ( $c(\text{HTO}) = 1,6 \times 10^{-9}$  M) abgeschlossen. Die erhaltenen Diffusionsparameter ( $D_e = (1,3 \pm 0,2) \times 10^{-11} \text{ m}^2/\text{s}$ ,  $\alpha = (0,68 \pm 0,01)$ ) stimmen gut mit der früheren Messung in ACW-VGL überein. Somit konnte die Eindiffusion von  $1,0 \times 10^{-9}$  M  $^{238}\text{Pu(IV)}$  in den HCP-Kern in ACW-VGL gestartet werden.

#### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Überprüfung der Stabilität des Fe(II) in der ECC-Zelle mittels Anionen-Austauscher-Membran (fumasep FAB-PK)
- Batchexperimente zur Sorption von Pu(IV) an HCP in Gegenwart von gelöstem Fe mittels ECC unter hyperalkalinen und anaeroben Bedingungen in ACW-VGL
- Auswertung der Diffusionsexperimente mit  $^{237}\text{Np(V)}$  und  $^{238}\text{Pu(IV)}$  in HCP

#### 5. Berichte, Veröffentlichungen

G. Kraus: Diffusion von HTO in Zementstein und Bestimmung der Diffusionsparameter, 2022, (Bachelorarbeit)

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e. V., Bautzner Landstr. 400, 01328 Dresden		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11860B</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt B		
<b>Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit</b> Bereich C3: Sicherheitsnachweis, Feld: 3.1		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2020 bis 30.09.2023	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2022 bis 30.06.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 426.606,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Schmeide	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

Das Forschungsvorhaben erfolgt in Kooperation mit den Förderprojekten der Universitäten Mainz, Dresden, Saarbrücken, München, Heidelberg, Potsdam und des Karlsruher Instituts für Technologie.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- Für eine spätere zuverlässige Beschreibung des ternären Systems (Zementphase–Organik–Radionuklid), wird mittels NMR-Spektroskopie zunächst das binäre System (Radionuklid–Organik) in wässriger Lösung untersucht. Stellvertretend für organische Moleküle wurden für Nitritotriessigsäure (NTA) und in Zusammenarbeit mit dem Projektpartner TU Dresden für das Zementadditiv 2-Phosphonobutan-1,2,4-tricarboxylsäure (PBTC) umfassende Multikern-NMR-Untersuchungen durchgeführt, anhand derer die  $pK_s$ -Werte sowie die pH-abhängigen Strukturänderungen bestimmt wurden.
- Die Eu(III)–NTA-Komplexierung wurde bei pH 1-13 für zwei Ionenstärken (0.1 M und 1.0 M NaCl) mittels TRLFS untersucht und Stabilitätskonstanten für 1:1 und 1:2 Eu(III)–NTA-Komplexe bestimmt. Weiterhin wurden mittels NMR-Spektroskopie Probenserien für verschiedene NTA/Eu(III)-Verhältnisse mit Variation der Ionenstärke (0, 0.1, 0.5, 1.0, 2.0 und 3.0 M NaCl) bei pH=5 untersucht.
- Da NTA prinzipiell auch mit den in Zementphasen enthaltenen Ca- und Al-Ionen Komplexe bilden kann, haben auch hierzu Übersichtsmessungen stattgefunden. Es zeigt sich, dass die Ca(II)–NTA- bzw. Al(III)–NTA-Komplexe an sich weniger stabil sind als die mit Eu(III). Inwiefern jedoch der substanzielle Überschuss von Ca(II) bzw. Al(III) gegenüber Eu(III) die Speziation beeinflusst, ist Gegenstand geplanter Untersuchungen.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Der Einfluss von Ca(II) und Al(III) auf die Stabilität der Eu(III)–NTA-Komplexe soll mittels TRLFS sowie ( $^1\text{H}$ - und  $^{27}\text{Al}$ -) NMR-Spektroskopie systematisch untersucht werden.

Die Untersuchungen zur U(VI)- bzw. Eu(III)/Cm(III)-Rückhaltung an C-A-S-H-Phasen bei erhöhten Ionenstärken bzw. in Gegenwart von Organika (Gluconat, NTA, PBTC) werden weitergeführt. Veröffentlichung der Ergebnisse zur Eu(III)–NTA-Komplexierung.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Philipp, T., Huittinen, N., Shams Aldin Azzam, S., Stohr, R., Stietz, J., Reich, T., Schmeide, K.: Effect of Ca(II) on U(VI) and Np(VI) retention on Ca-bentonite and clay minerals at hyperalkaline conditions – New insights from batch experiments and luminescence spectroscopy. *Sci. Total Environ.* 842, 156837 (2022)

Kretzschmar, J., Wollenberg, A., Tsushima, S., Schmeide, K., Acker, M.: 2-Phosphonobutane-1,2,4-tricarboxylic acid (PBTC): pH-dependent behavior studied by means of multinuclear NMR spectroscopy. *Molecules* 27, 4067 (2022)

Schmeide, K., Huittinen, N., Shams Aldin Azzam, S., Brendler, E., Kretzschmar, J.: Uranium(VI) retention by calcium aluminosilicate hydrates (C-A-S-H) – Impact of temperature, ionic strength, and organic ligands. *RadChem 2022 - 19<sup>th</sup> Radiochemical Conference*, 15.-20.05.2022, Mariánské Lázně, Czech Republic (Vortrag)

Sieber, C., Kretzschmar, J., Schmeide, K., Stumpf, T.: Complexation studies of Eu(III) with NTA at high ionic strengths. *RadChem 2022 - 19<sup>th</sup> Radiochemical Conference*, 15.-20.05.2022, Mariánské Lázně, Czech Republic (Poster)

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Hermann-von-Helmholtz-Platz 1, 76344 Eggenstein-Leopoldshafen		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11860C</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt C		
<b>Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit</b> Bereich C3: Sicherheitsnachweis, Feld: 3.1		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2020 bis 30.09.2023	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2022 bis 30.06.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 411.017,50 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Altmaier	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

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



### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP1: (i) Experimente zur Quantifizierung des Einflusses der organischen Liganden EDTA und Oxalat auf die Sorption von Eu(III) an Bentonit (MX80) und CSH-Phasen fortgesetzt. Fokus auf EDTA, da Oxalat durch die Ausfällung einer Ca-Oxalat-Festphase begrenzt ist. (ii) Batchexperimente mit systematischer Variation von [EDTA], bei  $10^{-8}$  bis  $10^{-1}$  M [EDTA],  $I_m = 1.02$  (NaCl, CaCl<sub>2</sub>), pH = 5 + 11 (Bentonit), C/S = 0.6 + 1.1 (CSH). (iii) Für Bentonit zeigen Analysen im NaCl-Medium eine systematische Abnahme des log R<sub>d</sub> mit zunehmender EDTA-Konzentration. Im CaCl<sub>2</sub>-Medium ist bei [EDTA]<sub>tot</sub> <  $10^{-4}$  M kein Einfluss des Liganden zu erkennen, während bei höheren [EDTA]<sub>tot</sub> eine Abnahme der Sorption von Eu(III) erfolgt. (iv) Für CSH-Phasen ist in beiden Elektrolytsystemen für [EDTA]<sub>tot</sub> ≤  $10^{-2.5}$  eine nahezu quantitative Sorption von Eu(III) zu sehen (log R<sub>d</sub> = 5 ± 1). Bei höheren [EDTA] sinkt der R<sub>d</sub>-Wert um 3-5 Größenordnungen, was mit einer Auflösung der CSH-Phasen interpretiert wird.
- AP2: (i) Eine Literaturstudie zu den Systemen An(VI)-Silikat wurde durchgeführt. (ii) Vorläufige thermodynamische Rechnungen für An(VI)-Silikat sind für alkalischen Bedingungen erfolgt. (iii) Synthese des Na<sub>2</sub>U<sub>2</sub>O<sub>7</sub>(s,hyd) Festkörpers für Löslichkeitsexperimente im U(VI)-Silikat System wurde abgeschlossen. (iv) Start der umfangreichen Löslichkeitsexperimente (aus Untersättigung) im alkalischen U(VI)-Silikat System. (v) Start der spektroskopischen TRLFS Analysen im U(VI)-Silikat System.
- AP3: Organisation und Teilnahme von Frau Aline Thumm am internen Online-Doktoranden-seminar der im GraZ II-Projekt arbeitenden Doktoranden der jeweiligen Verbundpartner.
- AP4: Es sind hierzu von KIT-INE keine Aktivitäten in frühen Projektphasen geplant.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1: (i) Untersuchung des Einflusses der Reihenfolge der Zugabe von Festphase, organischem Ligand und Metallion. Einfluss von EDTA auf die Sorption von Eu(III) an CSH-Phasen in NaCl und CaCl<sub>2</sub>-Lösungen. Batch-Experimente über längeren Zeitraum von t > 70 Tagen mit drei Zugabe-Reihenfolgen: 1.) Eu(III) → Ligand, 2.) Eu(III) + Ligand, 3.) Ligand → Eu(III). (ii) TRLFS-Untersuchungen von Cm(III) in ausgewählten CSH/Lösungssystemen, mit dem Ziel der Identifizierung der vorliegenden Lösungs- und Festphasen-Spezies.
- AP2: (i) Abschluss der Löslichkeitsexperimente (aus Untersättigung) im U(VI)-Silikat System. (ii) Abschluss der TRLFS Analysen im U(VI)-Silikat System. (iii) Thermodynamische Modellierung des (VI)-Silikat Systems. (iv) Start der Erstellung eines Manuskripts zu den TRLFS Analysen im U(VI)-Silikat System. (v) Literaturstudie zu dem System An(IV)-Silikat. (vi) Vorläufige thermodynamische Rechnungen für An(IV)-Silikat für alkalischen Bedingungen.
- AP3: Das interne Online-Seminar für die Doktorand/innen in GRaZ II wird fortgeführt und entsprechende inhaltliche Beiträge von KIT-INE vorbereitet.
- AP4: Es sind hierzu von KIT-INE keine Aktivitäten in frühen Projektphasen geplant.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Posterpräsentation: A. Thumm et al.: „Sorption of Eu(III) on C-S-H phases in the presence of EDTA and oxalate“ bei NUWCEM Konferenz, Mai 4-6 (2022), Avignon, Frankreich

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Universität des Saarlandes, Campus, 66123 Saarbrücken		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11860D</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt D		
<b>Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit</b> Bereich C3: Sicherheitsnachweis, Feld: 3.1		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.01.2021 bis 30.09.2023	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2022 bis 30.06.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 549.256,50 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Kautenburger	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

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

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im Untersuchungszeitraum wurde eine kinetische Studie zum Rückhalt des erweiterten Waste Cocktails (Mo(VI), Ru(III), Zr(IV), Pd(II), Cs(I), Eu(III), Sm(III) und U(VI)) als Element-Gemisch über 217 d an der C-S-H-Phase Circosil durchgeführt. Die verwendeten Hintergrundelektrolyten waren 0,1 M NaCl und verdünnte Gipschlösung (VGL). Die eingesetzte Konzentration der Elemente des erweiterten Waste Cocktails betrug jeweils 500 nM.

Schon nach 1 d Equilibrierungszeit stellen sich in beiden Hintergrundelektrolyten konstante pH-Werte (0,1 M NaCl: pH = 10,9±0,1 und VGL: pH = 10,6±0,1) ein. Der Rückhalt von Sm(III), Eu(III), Ru(III) und Zr(IV) in 0,1 M NaCl an Circosil beträgt bereits nach 7 d >95 % und bleibt bis zum Ende des Experiments relativ konstant. Ausfällungsexperimente in 0,1 M NaCl zeigen für alle vier Elemente (c = 500 nM) eine Ausfällung zwischen 81 % und 85 %, so dass davon auszugehen ist, dass beim hohen Rückhalt dieser Elemente an Circosil Ausfällung auch im nanomolaren Konzentrationsbereich eine Rolle spielt. In VGL steigt der Rückhalt der vier Elemente langsamer an. Nach 28 d ist ein Rückhalt >90 % zu verzeichnen. Auch U(VI) wird an Circosil in beiden Hintergrundelektrolyten schnell und nahezu quantitativ immobilisiert (Rückhalt >95 % nach 7 d). Im Gegensatz zu Sm(III), Eu(III), Ru(III) und Zr(IV) spielt die Ausfällung in 0,1 M NaCl aber nur eine untergeordnete Rolle (<20 %). Mo(VI) liegt bei diesen Versuchsbedingungen als MgO<sub>4</sub><sup>2-</sup> in Lösung vor und wird kaum bzw. nicht an Circosil zurückgehalten (Rückhalt <5 %).

Der Rückhalt von Cs(I) und Pd(II) an Circosil ist stark abhängig von der Ionenstärke. In 0,1 M NaCl lassen sich ca. 80% des Cs(I) und Pd(II) nahezu quantitativ immobilisieren, während in VGL der Rückhalt <20 % (Cs(I)) bzw. ≤70 % beträgt. Für Pd(II) zeigt der Rückhalt in VGL über die 217 d einen dynamischen Verlauf und es wird kein stationärer Zustand erreicht.

Ergänzend zu den Stabilitätsstudien aus dem 1. Halbjahr 2021 wurde ein Experiment zur Langzeitstabilität der selbst hergestellten C-S-H-Phase, der selbst hergestellten C-S-H-Phase mit Zusatz von 2-Phosphonobutan-1,2,4-tricarbonsäure (PBTC) und Circosil angesetzt.

Ferner wurde eine Methode zur Durchführung von Minisäulen-Sorptions-Experimenten (MSE) mittels HPLC an C-S-H-Phasen entwickelt. Ursprünglich war eine Validierung der Analyt-Wiederfindungsrate mittels einer HPLC-ICP-MS-Kopplung angedacht. Diese konnte allerdings auf Grund von Auslaugung und demzufolge zu hohen Ca(II)- und Si(IV)-Konzentrationen im Eluat noch nicht umgesetzt werden. Es zeigte sich, dass es während den jeweiligen Experimenten, sowohl mit selbst-synthetisierten C-S-H-Phasen als auch mit Circosil, zu einem Ausspülen von nanopartikulären Stoffen kommt. Messungen mittels ICP-MS und DLS ergaben, dass zu Anfang der Experimente primär 20-40 nm große SiO<sub>2</sub>-Nanopartikel ausgespült werden, während im späteren Verlauf ein kohärentes Auflösen der jeweiligen C-S-H-Phasen zu beobachten ist. Die aus ersten MSE mit Mo(VI) an Circosil erhaltenen Durchbruchkurven können klar die Ergebnisse aus den Batch-Experimenten bestätigen. Die jeweiligen Säulen sind nach kürzester Zeit abgesättigt und es wird dementsprechend schnell ein Plateau in der Mo(VI)-Wiederfindungsrate von ca. 93 % erreicht.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Im nächsten Untersuchungszeitraum soll die Studie zur Langzeitstabilität der selbst hergestellten C-S-H-Phasen (in Anwesen- und Abwesenheit von PBTC) und Circosil gegenüber CO<sub>2</sub> aus der Luft abgeschlossen werden. Es werden Batch-Experimente zum Rückhalt des erweiterten Waste Cocktails (einzeln und als Gemisch) an Circosil durchgeführt und zusätzlich der Einfluss von Fe(II) und PBTC untersucht. Weiterhin sollen die erarbeitete Methode für die MSE auf den gesamten Waste-Cocktail ausgeweitet werden.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Haben A. (2022): „Methodenentwicklung zur Durchführung von Minisäulenexperimenten im Rahmen der Endlagerforschung“. Masterarbeit, Naturwissenschaftlich-Technische Fakultät, Universität des Saarlandes  
 Kautenburger, R., Brix, K., Baur, S., & Sander, J. M. (2022): Development of mini column experiments (MCE) by coupling microliter flow HPLC with ICP-MS for the analysis of metal retention under conditions close to nature. *Talanta Open* 5, 100111

Baur, S., Brix, K., Feuerstein, A., Janka, O., & Kautenburger, R. (2022): Retention of waste cocktail elements onto characterised calcium silicate hydrate (C-S-H) phases: A kinetic study under highly saline and hyperalkaline conditions. *Applied Geochemistry* 143, 105319

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Technische Universität München, Arcisstr. 21, 80333 München		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11860E</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt E		
<b>Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit</b> Bereich C3: Sicherheitsnachweis, Feld: 3.1		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2020 bis 30.09.2023	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2022 bis 30.06.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 523.530,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Krüger	

### 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Das Untersuchungsprogramm umfasst folgende Arbeitspakete (AP):

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

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

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

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

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

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

AP1.3: Die laufende Untersuchung des Sorptionsmechanismus von U(IV) an CSH-Phasen wurde um Modellierungen der Adsorption an der (001)-Oberfläche von 14 Å-Tobermorit mit C/S = 1 ergänzt. Ergebnisse eines Oberflächenmodells mit mehreren Kettendefekten werden mittels eines neuen Oberflächenmodells ohne oder mit einem Kettendefekt überprüft. Daneben wurde nach fehlenden Sorptionsplätzen im ursprünglichen Model gesucht. Für alle Oberflächenmodelle wurden inzwischen monodentate, bidentate, kettenverbrückende und Defektplätze gefunden, wobei übereinstimmend monodentate Plätze bevorzugt sind. Variationen der Sorbate bezüglich der Zahl der OH- und Wasserliganden werden derzeit durchgeführt. Für den mono-

und den bidentaten Platz wird bereits bestätigt, dass der Grad der Hydrolyse mit der Art des Platzes variiert. Gelegentlich geringe Energieunterschiede zwischen den Sorbatvarianten auf einem Platz weisen darauf hin, dass auch auf einem gegebenen Platz verschiedene Sorbate vorkommen können. Entsprechende Modellierungen für kettenverbrückende und Defektplätze sind derzeit noch in Arbeit. Bisher berechnete Energien bestätigen, dass für U(IV) der Einbau in die CaO-Schicht von CSH der bevorzugte Sorptionsmechanismus ist, jedoch daneben auch Plätze in der Zwischenschicht und an der (001)-Oberfläche vorkommen können. Strukturen stimmen mit EXAFS-Daten zu Pu(IV) des Projekt-partners Mainz gut überein und sogar sehr gut, wenn man annimmt, dass gemessene Koordinationszahlen (CN) etwas überschätzt sind, und bestätigen damit den Sorptionsmechanismus.

AP1.5: Die Untersuchung der Sorption von Fe(II) in CSH-Phasen wurde im Wesentlichen durch Modellierungen der Sorption in der Zwischenschicht von 14 Å-Tobermorit mit C/S = 1 erweitert. Bisherige Ergebnisse zeigen, dass im Gegensatz zu C/S = 0.67 Mono- und Dihydroxokomplexe als Sorbate auftreten. Energieunterschiede zwischen verschiedenen Plätzen sind auch für höheres C/S oft gering (< 15 kJ/mol), so dass für Fe(II) im Vergleich zu Actinoiden eher verschiedene Plätze gleichzeitig besetzt werden. Geometriedaten zeigen, dass auch für C/S = 1 Fe-O-Abstände für CN = 4 mit dem Experiment übereinstimmen. Fe-Si-Abstände werden im Gegensatz zum Experiment kürzer als Fe-Ca-Abstände berechnet. Als wesentlicher Unterschied zum Experiment wird bestätigt, dass berechnete Fe-Si-Abstände im Mittel kürzer und Fe-Ca-Abstände deutlich länger sind. Dem Experiment entsprechende Fe-Ca-Abstände sind möglich, jedoch nicht im Mittel. Bezüglich der CN stimmen die Ergebnisse für C/S = 1 besser mit dem Experiment überein als für C/S = 0.67. Diese Modellierungen werden derzeit auf weitere Plätze ausgedehnt. Ergänzende Rechnungen mit vier Fe(II) im Austausch von vier Ca<sup>2+</sup> für C/S = 0.83 bestätigen eine leichte Kontraktion des Zwischenschichtabstandes im Gegensatz zum Experiment.

AP2.1: Mit der Modellierung von U(VI)-Silikatkomplexen wurde anhand des einfach und zweifach deprotonierten Monosilikatliganden begonnen. Für den monodentaten Komplex mit OSi(OH)<sub>3</sub><sup>-</sup> wurde eine bevorzugte CN von 5 und eine geringere Bindungsenergie im Vergleich mit Experimenten gefunden. Der entsprechende Disilikatkomplex zeigt energetisch nahezu entartete Isomere und charakteristische U-Si Abstände wie das Monosilikat. Für den bidentaten Komplex mit O<sub>2</sub>Si(OH)<sub>2</sub><sup>2-</sup> wurden ebenfalls nahezu entartete Isomere gefunden sowie ein deutlich kürzerer U-Si-Abstand. Die energetisch erniedrigte 2. Deprotonierung des Silikatliganden im Komplex deutet darauf hin, dass der neutrale Komplex UO<sub>2</sub>O<sub>2</sub>Si(OH)<sub>2</sub> bereits bei pH < 11, was dem 2. pK<sub>a</sub>-Wert der Orthokieselsäure entspricht, auftreten kann.

#### 4. Geplante Weiterarbeiten

AP1.1: Modelle

AP1.3: Sorption an (001)-Oberfläche

AP1.5: Sorption und Konkurrenz Fe

AP2.1: Monosilikatkomplexe

AP2.2: Oligosilikatkomplexe

#### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Universität Potsdam, Am Neuen Palais 10, 14469 Potsdam		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11860F</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt F		
<b>Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit</b> Bereich C3: Sicherheitsnachweis, Feld: 3.1		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2020 bis 30.09.2023	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2022 bis 30.06.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 482.418,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Kumke	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

Das Verbundprojekt enthält vier Arbeitspakete (AP):

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

## 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

In AP1 wurde die Sorption von Eu(III) an CSH-Templatphasen (auf Basis von SiO<sub>2</sub>- und CaO-Nanopartikeln, C/S=0.8, pH≈9.8) in Gegenwart und Abwesenheit von NTA und Gluconat über einen Zeitraum von 211 Tagen weiter untersucht. Hierbei wurde unter anderem die Ionenstärke variiert (2.6 M NaCl und 0.01 M NaCl), um den Einfluss der NaCl-Konzentration auf das Sorptionsverhalten zu erfassen. Weiterhin wurden Desorptionsexperimente begonnen, in denen die CSH-Phasen in Anwesenheit von Eu(III) hergestellt wurden und anschließend mit Ligand-Lösung versetzt wurden. Zusätzlich laufen Untersuchungen zu den binären „Eu(III)/Ligand“ bzw.

ternären „Eu(III)/Ligand/Ca(II)“-Systemen bei hohen pH-Werten, um die Ergebnisse der Sorptionsexperimente zu komplementieren. Die Arbeiten zur Komplexierung von Ln(III) durch Kieselsäure(n) unter Verwendung von TRLFS in AP2 wurden bei erhöhten pH-Werten weitergeführt. Die Auswertung der TRLFS-Daten (AP1, AP2) erfolgte mit Matlab (PARAFAC-Algorithmus) zur spektroskopischen Identifikation der verschiedenen Eu(III)-Spezies (sorbiert oder in Lösung). Untersuchungen zu Auswirkungen der Zugabe-Reihenfolge in den ternären Systemen wurden begonnen. Es wurden CSH-Phasen bei sofortiger Zugabe von Eu(III) (und weiterer Ln(III)-Ionen für FRET-Experimente) hergestellt und werden aktuell untersucht (Desorptionsexperimente), z. B. für die Beschreibung des Sorptionsendpunktes. Für die Untersuchungen in AP1 wurden so in Kombination mit der Sorptionszeit Spezies-selektive Kinetiken für die An- und Einlagerung von Eu(III) in Verbindung mit CSH-Phasen erhalten. Weiterhin wurde die Charakterisierung der elektrochemischen Messzelle/Küvette für die Transienten-Absorptionsspektroskopie (TAS) abgeschlossen. Für die Speziationbetrachtungen wurde PHREEQC in das Analysenportfolio aufgenommen.

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

Die Experimente mit „Nano“CSH-Templatphasen (SiNP und CaO als Nanomaterial) werden unter Variation von Systemparametern (z. B. Ionenstärke, C/S, S/L) fortgeführt. Der Einfluss von Organik (z. B. Gluconat, NTA, Phthalat) auf die Sorption/Inkorporation von Eu(III) an/in CSH-Phasen wird unter den variierten Systemparameter weiter untersucht. Schwerpunkt werden TRLFS-Untersuchungen in Kombination mit einer PARAFAC-Auswertung sein, ergänzt um weitere Charakterisierungsmethoden (XRD, SEM für CSH-Phasen, ICP-OES für [Eu(III)] im Überstand usw.). Die Spezies-aufgelösten Sorptionskinetiken werden modelliert mit dem Ziel der Bestimmung von Ratenkonstanten für Sorption (und Desorption). Es werden Desorptionsuntersuchungen fortgesetzt, in dem CSH-Phasen in Anwesenheit von Eu(III) hergestellt und anschließend mit Organik (s. o.) in der flüssigen Phase versetzt werden. Die TRLFS-Untersuchungen unter Nutzung von Yb(III) als Lumineszenzsonde in Fe-haltigen Festphasen werden weitergeführt. Die Arbeiten zur Komplexierung von Eu(III) durch Kieselsäure(n) wird auf höhere Kieselsäure-Konzentrationsbereiche erweitert mit der Zielsetzung, die Bildung von Polykieselsäuren (bzw. Kolloiden) zu charakterisieren. Eine quantitative Analytik basierend auf einem Molybdänkomplex-Nachweis wird etabliert. In diesem Zusammenhang soll auch der mögliche Alterungseinfluss betrachtet werden. Die Arbeiten zur Kombination von TAS und Spektroelektrochemie werden fortgesetzt. Neben Fe(II)/Fe(III)-Verbindungen erfolgen Untersuchungen zur Redoxumwandlung von U(IV)/U(VI) mittels Transienten-Absorptionsspektroskopie.

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

Masterarbeit von Frau Ronja Kraft „Ultraschnelle Spektro-Elektrochemie – Untersuchung von redoxaktiven Komplexen mittels TAS“, Potsdam, Februar 2022

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Technische Universität Dresden, Helmholtzstr.10, 01069 Dresden		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11860G</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt G		
<b>Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit</b> Bereich C3: Sicherheitsnachweis, Feld: 3.1		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2020 bis 30.09.2023	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2022 bis 30.06.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 374.721,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Stumpf	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

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

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

Geplant sind Batchsorptionsuntersuchungen mit Actiniden in gut charakterisierten (Poly)silicat-Ligand-Suspensionen. Die Sorptionsisothermen und Verteilungskoeffizienten ( $K_d$ -Werte) sollen als Funktion der Ionenstärke (bis 3 m NaCl, CaCl<sub>2</sub>) und des pH-Wertes bestimmt werden.



### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP-TU1a) 1) Konzeptionierung und Anfertigung eines Manuskriptes zur Veröffentlichung der mittels Mehrkern-NMR-Spektroskopie ermittelten pKs-Werte von PBTC, Veröffentlichung im Journal Molecules (Pkt. 5).

AP-TU1b) Fortsetzung der Arbeiten zur strukturellen Charakterisierung der U(VI)-PBTC-Komplexierung mittels TRLFS, UV-Vis und NMR-Spektroskopie: Analyse bisher aufgenommener Datenreihen, jeweils in 0.5 m NaCl-Medium.

1) Die PARAFAC-Auswertung der TRLFS-Datenreihen mit einer U(VI) Konzentration von 0.1 mM ergab, dass eine hochlösliche U(VI)-PBTC-Komplexspezies über den gesamten betrachteten pH-Bereich existiert, die bei deutlichen PBTC-Überschuss gebildet wird. Es wird eine 1:2 Komplexspezies angenommen (abgeleitet aus Steigungsanalysen). Weitere, wahrscheinlich intermediäre U(VI)-PBTC-Komplexspezies wurden zwischen pH 6 und 8 bis zu einem U(VI):PBTC-Verhältnis von ca. 1:1 gefunden.

2) Die faktoranalytische Auswertungen pH abhängiger UV/Vis Untersuchungen mit [U(VI)] = 1 mM und 10-fachem Überschuss an PBTC-Ligand deuten auf drei U(VI)-PBTC-Komplexspezies hin: im stark sauren pH-Bereich dominiert Spezies 1, Spezies 2 ist existent über einen weiten pH-Bereich von 2 bis ca. 8, im alkalischen pH-Werten (ab pH  $\gg$  7) bildet sich Spezies 3. Die UV/Vis-Spektren der einzelnen Komponenten zeigen deutliche Feinstrukturen. Die Anwendung der JOB-Plot-Methode bei pH  $\sim$ 4 ergab, dass Spezies 2 wahrscheinlich ein 1:2 U(VI)-PBTC-Komplex ist.

3) Eine vorläufige Interpretation der aufgenommenen pH-abhängigen  $^{31}\text{P}$ -NMR Spektren ergibt, dass die breiten  $^{31}\text{P}$ -Signale von freien als auch U(VI) gebunden PBTC bei niedrigen pH-Werten auf einen schnellen Austausch zwischen den PBTC-Spezies hinweisen und wahrscheinlich hier eine monodentate Anbindung des U(VI) am PBTC über die Phosphonatgruppe vorliegt. Mit steigendem pH werden die Signal schmaler, der Austausch zwischen den PBTC-Spezies wird reduziert. Es erfolgt eine Chelatbindung des U(VI) über die Phosphonatgruppe und eine Carboxylgruppe. Die quantitative Auswertung der  $^{31}\text{P}$ -Signale von PBTC ab pH 6 ergibt, dass wahrscheinlich eine Mischung einer 1:2 als auch einer 1:3 U(VI)-PBTC-Komplexspezies vorliegen könnte. Erste Strukturmodelle wurden entwickelt. Wahrscheinlich ist eine Bindung des U(VI) in einem 6-Ring-Chelatkomplex über die Phosphonat und mit der am selben C-Atom vorhandene Carboxylatgruppe.

4) Untersuchungen im System U(VI)-PBTC mittels Ramanspektroskopie wurden begonnen.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Ausweitung und Fortsetzung der spektroskopischen Charakterisierung der U(VI)-PBTC-Komplexbildung im pH-Bereich 1 bis 12 mittels TRLFS, NMR-, UV-Vis-Spektroskopie jeweils mit deutlich geringeren U(VI)-Konzentrationen als die bisherigen Versuchsreihen, variable PBTC-Konzentrationen (von Unterschuss bis deutlichem Überschuss), Zuordnung der einzelnen U(VI)-PBTC-Spezies zu Strukturmodellen
- DFT-Rechnungen zu den Strukturmodellen der U(VI)-PBTC-Komplexspezies
- Durchführung von IR- und Ramanmessungen zur unterstützenden Charakterisierung der U(VI)-PBTC-Komplexstrukturen und -speziation
- Abschließende Bestimmung der Speziation, Struktur sowie der Komplexkonstanten der U(VI)-PBTC-Komplexe im pH Bereich von 1 bis 12
- Aufreinigung des kommerziellen PBTC mittels präparativer HPLC

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Wollenberg, J. Kretzschmar, S. Tsushima, M. Acker, S. Taut, T. Stumpf: Spectroscopic investigation of the complexation of U(VI) with 2-Phosphonobutane-1,2,4-tricarboxylic acid (PBTC) in the pH range of 2 to 10, Posterbeitrag, 19th Radiochemical Conference, 15.-20. Mai 2022, Marienbad, Tschechien

J. Kretzschmar, A. Wollenberg, S. Tsushima, K. Schmeide, M. Acker: 2-Phosphonobutane-1,2,4-Tricarboxylic Acid (PBTC): pH-Dependent Behavior Studied by Means of Multinuclear NMR Spectroscopy, Molecules 2022, 27, 4067

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Universität Heidelberg, Grabengasse 1, 69117 Heidelberg		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11860H</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt H		
<b>Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit</b> Bereich C3: Sicherheitsnachweis, Feld: 3.1		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2020 bis 30.09.2023	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2022 bis 30.06.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 403.292,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Panak	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im Rahmen von AP2.3 wurden die grundlegenden colorimetrischen Untersuchungen zur Polymerisation von Silicaten in wässriger Lösung weitergeführt. Dadurch sollte eine Quantifizierung der Polymerisation von Silicat als Funktion der Silicatkonzentration ( $c_{\text{SiO}_2} = 3.5 \cdot 10^{-5} \text{ M}$ ,  $3.5 \cdot 10^{-4} \text{ M}$ ,  $3.5 \cdot 10^{-3} \text{ M}$ ), des pH-Werts (pH 2 – 11), der Ionenstärke ( $I_{\text{NaCl}} = 0.4 \text{ M}$  bzw.  $5.0 \text{ M}$ ) und der Zeit (0 – 12 Wochen) erreicht werden. Die colorimetrische Speziation basiert darauf, dass nur mono- und dimere Silicate mit Ammoniummolybdat unter reduktiven Bedingungen einen blauen Komplex bilden (Silicomolybdän-Blau), der photometrisch bei 823 nm detektiert wird. Die Ergebnisse dieser Untersuchungen zeigen, dass bei der niedrigsten Konzentration ( $3.5 \cdot 10^{-5} \text{ M}$ ) keine Polymeren nachgewiesen werden konnten, während sich bei einer Silicatkonzentration von  $3.5 \cdot 10^{-4} \text{ M}$  Polymere ausschließlich bei der hohen Ionenstärke ( $I_{\text{NaCl}} = 5.0 \text{ M}$ ) bilden. Auch die Untersuchungen bei höheren Silicatkonzentrationen zeigen einen starken Einfluss der Ionenstärke auf die Polymerisation von Silicaten, wobei hohe Ionenstärken die Polymerenbildung stark begünstigen. Die pH-abhängigen Studien ergaben zudem, dass die Bildung der Polymeren auf den pH-Bereich von 5 – 10 beschränkt ist, und somit polymere Silicatspezies im zementrelevanten pH-Bereich (pH 10 – 12.5) keine Rolle spielen, was in exzellenter Übereinstimmung mit dem Löslichkeitsdiagramm für amorphes Silica steht. Darüber hinaus belegen zeitabhängige Untersuchungen, dass die Polymerisation einer Kinetik unterliegt, die insbesondere bei niedrigen Silicatkonzentrationen sehr langsam ist.

Im Hinblick auf die Wechselwirkung der monomeren und polymeren Silicate mit trivalenten Actiniden wurde die Komplexierung von Cm(III) bei unterschiedlichen Si-Konzentrationen ( $c_{\text{SiO}_2} = 3.4 \cdot 10^{-5}$  bis  $3.4 \cdot 10^{-2} \text{ M}$ ), einer niedrigen ( $I_{\text{NaCl}} = 0.4 \text{ M}$ ) und einer hohen Ionenstärke ( $I_{\text{NaCl}} = 5.0 \text{ M}$ ) im pH-Bereich von 2 - 12.5 mittels zeitaufgelöster Laserfluoreszenz-spektroskopie (TRLFS) untersucht. Alle Proben wurden dabei in einer Inertgasbox (mit Argonschutzatmosphäre) präpariert. Während bei niedrigen pH-Werten das Cm-Aquoion dominiert, wird die Speziation bei höheren pH-Werten (pH 5 - 9.5) im Wesentlichen durch die Wechselwirkung mit den polymeren Silicatspezies bestimmt. Dabei zeigt sich ein starker Einfluss der Ionenstärke auf die Cm(III)-Speziation. Hohe Ionenstärken begünstigen die Wechselwirkung von Cm(III) mit den polymeren Silicaten, gleichzeitig wird die Bildung des Cm-Monosilicatkomplexes unterdrückt, der bei der niedrigen Ionenstärke ( $I_{\text{NaCl}} = 0.4 \text{ M}$ ) für alle untersuchten Silicatkonzentrationen nachgewiesen wurde. Die Untersuchungen bei niedrigen Konzentrationen zeigen zudem, dass auch für Konzentrationen unterhalb der Löslichkeitskonzentration des amorphen Silicas eine Komplexierung von Cm(III) mit polymeren Silicatspezies erfolgt. Für pH-Werte  $> 9.5$  konnte dagegen keine Wechselwirkung mit monomeren oder polymeren Silicaten nachgewiesen werden, was bestätigt, dass im zementrelevanten pH-Bereich die Hydrolyse dominiert.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Untersuchungen zur Polymerisation von Silikaten in  $\text{CaCl}_2$ -Lösungen
- Detaillierte Speziationsuntersuchungen zur Wechselwirkung von Cm(III) mit Silicaten
- Weitere Studien zur Komplexierung von Cm(III) mit organischen Liganden/Carbonaten
- Ausweitung der Studien zur Wechselwirkung von An(III)/Ln(III) mit polymeren Polycarboxylat-Superplasticizern auf den neutralen bis alkalischen Bereich.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11870A</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt A		
<b>Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit</b> Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte, Feld: 2.3		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.01.2021 bis 31.12.2023	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2022 bis 30.06.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 963.287,72 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Melesyhn	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

Im AP1 „Zersetzung von Karbonaten und CO<sub>2</sub>-Freisetzung“ (Federführung: GRS) sollen dafür im GRS-Labor Versuche mit Bentoniten, reinen Mineralphasen und aus diesen hergestellten Mineralgemischen in Metallzylindern bei 120 °C sowie anschließende Gasanalysen und Bestimmungen der Karbonatgehalte, pH-Werte und Zusammensetzungen der Kontaktlösungen durchgeführt werden. Die Versuche und ihre Auswertung sollen durch die unterstützende geochemische Modellierung begleitet werden.

Im AP6 koordiniert die GRS die Arbeiten im Verbundprojekt.

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

Im Berichtszeitraum wurde die Versuchsreihe zur Ermittlung des optimalen Feststoff-Flüssig-Verhältnisses beendet und ausgewertet. Anhand der Analyse der CO<sub>2</sub>-Freisetzung aus dem Bentonit B19 wurde der Feststoff-Flüssig-Verhältnis auf 200 g/l (1 g auf 5 ml) festgelegt. In der Versuchsreihe zur Herstellung der Bentonitproben für Beamline-Computertomographie wurden mit Ausnahme der letzten Probe, die noch bis Anfang 2023 konditioniert wird, alle Proben vorbereitet und an die LUH-IfBK übergeben. Eine Abstimmung der Versuchsdurchführung im AP1 erfolgte mit der UG und LUH-IfBK.

Die Koordination des Verbundprojektes bestand in der Organisation der dritten Videokonferenz bzw. Präsenzworkshops, welcher am 10. März 2022 durch die UG 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.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e. V., Bautzner Landstr. 400, 01328 Dresden		<b>Förderkennzeichen:</b>  <b>02 E 11870B</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt B		
<b>Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit</b> Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte, Feld: 2.3		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.01.2021 bis 31.12.2023	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2022 bis 30.06.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 359.046,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Matschiavelli	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Bentonit-basierte Nahfeldbarrieren können in einem Endlager für hoch-radioaktive Abfälle aufgrund erhöhter Temperaturen und einer Wechselwirkung mit wässrigen Lösungen aus dem umliegenden Wirtsgestein eine für die Langzeitsicherheit des Endlagers relevante Umwandlung erfahren. Im Projekt UMB wurde festgestellt, dass bei 25, 90 und 120 °C eine erhebliche pH-Absenkung sowie eine CO<sub>2</sub>-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 Smekтите vom Bentonit-Typ, (ii) der Einfluss der Fe(II)/Fe(III)-Redoxreaktion (experimenteller und quantenchemischer Ansatz), (iii) die Unterschiede in Korrosionsraten und –produkten an einer Eisen-Bentonit-Grenzfläche (mit Einsatz einer zu optimierenden Mössbauerspektroskopie) und (iv) der Einfluss der Bentonit-eigenen mikrobiellen Population.

Die unter (iv) genannten mikrobiellen Arbeiten werden am HZDR durchgeführt. Hierzu werden Mikrokosmen angesetzt, welche mit einem Bentonit (B27 oder GMZ), synthetischer Opalinuston-Porenlösung (OPA) und Gusseisenplättchen (Typ GGG40) versehen werden. Die Ansätze inkubieren für mindestens ein Jahr jeweils bei 37 und 90 °C mit und ohne Zugabe von Wasserstoff.

Innerhalb der Kooperationspartner (Förderkennzeichen 02E11870)

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

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

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

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

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 beprobt.

Im dritten Berichtszeitraum wurden die 224 Mikrokosmen nach 196 Tagen Inkubation beprobt und zeigten bereits deutliche Unterschiede zu jenen Mikrokosmen, welche nur einen Tag inkubierten. Alle bei 37 °C inkubierten B27-Mikrokosmen mit GGG40-Plättchen zeigten nahe der Plättchen schwarze Verfärbungen. Diese Verfärbungen waren besonders ausgeprägt, wenn sich gleichzeitig auch Wasserstoff in den entsprechenden Ansätzen befand. Das Vorhandensein von Wasserstoff führte in allen bei 37 °C inkubierten B27-Ansätzen zu einer signifikanten Abnahme der Sulfat-Konzentration von 15 mM auf etwa 8 mM. In den entsprechenden Kontroll-Ansätzen blieb die Sulfat-Konzentration konstant. Des Weiteren weisen SEM-EDX-Analysen der Universität Greifswald auf das Vorhandensein von Pyrit auf den entsprechenden GGG40-Oberflächen hin. B27-Mikrokosmen, welche bei 70 °C inkubierten, zeigten nur leichte, grünliche Verfärbungen im Bereich der GGG40 Plättchen und keine Abnahme der Sulfat-Konzentration.

Im Gegensatz zu den B27-Ansätzen, zeigten sich die GMZ-Mikrokosmen eher unauffällig. Ansätze mit GGG40-Plättchen zeigen leicht grünliche bis bläuliche Verfärbungen im Bereich der Plättchen. Wasserstoff-haltige GMZ-Mikrokosmen sind im Gegensatz zu den entsprechenden B27-Mikrokosmen unauffällig und zeigen auch keine Veränderungen in der Sulfat-Konzentration.

Die bisherigen Beobachtungen lassen auf die Aktivität von Sulfat-reduzierenden Mikroorganismen in Wasserstoff-haltigen B27-Mikrokosmen schließen. Ein potentieller mikrobieller Einfluss auf die Korrosion der GGG40 Plättchen ist daher nicht auszuschließen.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Im vierten Berichtszeitraum des UMB-II Projektes wird eine dritte Beprobung nach weiteren 154 Tagen stattfinden (nach 350 Tagen Inkubation). Korrosionsanalysen wie SEM-EDX sowie die Analyse der Oberflächenrauheit der GGG40-Plättchen werden wieder in Zusammenarbeit mit der Universität Hannover und der Universität Greifswald durchgeführt. Des Weiteren soll die mikrobielle Diversität ausgewählter Proben bestimmt und die Ergebnisse verglichen werden.

Die Teilnahme und Präsentation an der ISME18-Konferenz im August 2022 wurde bestätigt und ist geplant.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Vorträge:

Matschiavelli, N.: Progress report des Verbundprojektes UMB-II-Microbial Influence on Cast Iron Corrosion under Repository-Relevant Conditions; 3rd project meeting UMB-II, Universität Greifswald, 10.03.2022

Matschiavelli, N.: Die Rolle von Mikroorganismen bei der Lagerung von hoch-radioaktiven Abfällen - Mikrobiologie am HZDR; eingeladener Vortrag zum „Girls` and Boys` day“ 2022. Tag der Wissenschaften am Beruflichen Schulzentrum für Gastgewerbe in Dresden, 23.11.2021

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Universität Greifswald, Domstr. 11, 17489 Greifswald		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11870C</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt C		
<b>Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit</b> Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte, Feld: 2.3		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.01.2021 bis 31.12.2023	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2022 bis 30.06.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 244.830,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Warr	

### 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Die Arbeitsschwerpunkte (AP3) der Universität Greifswald sind die Veränderungen der Smektitzusammensetzung sowohl in natürlichen als auch in synthetisch gemischten Bentonitproben. Die Reaktionsmechanismen der Smektitänderungen werden in mineralogischen und geochemischen Vergleichsstudien untersucht. Zusätzlich wird der Einfluss verschiedener akzessorischer Mineralien (AP1, AP3), bei der CO<sub>2</sub>-Freisetzung (AP2), pH Änderung und zum Redoxzustand (AP2) bestimmt. Änderungen der Smektitzusammensetzung werden auch in Bezug auf mikrobielle Aktivität (AP4) sowie der Korrosion des Fe-Metallkanisters (AP5) untersucht.

### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Das erste Batch-Reaktor-Experiment (AP2: Monate 3-12) ist nun abgeschlossen und die Proben wurden für die Analysen entnommen. Die Ergebnisse der mineralogischen und geochemischen Untersuchungen mittels XRD, EDX-SEM und MP-AES liegen vor und zeigen, in Abhängigkeit von der Art der zugesetzten Begleitminerale, unterschiedliche Grade der Smektit-Alterierung. Am stärksten alteriert sind diejenigen, die K-Oxalat enthalten, wobei der Smektit weitgehend zu einem 2:1 glimmerartigen Tonmineral mit seladonitischer Zusammensetzung umgewandelt wurde. Nach der Charakterisierung der Mineralumwandlungen im ersten Experiment wurde ein Plan für die nächste Reihe von Batch-Experimenten erstellt. Dafür wurden stärker verdünntes NaCl und niedriger konzentriertes K-Oxalat zusammen mit derselben Konstellation an Begleitmineralen gewählt.



Ausgewählte Proben wurden im TEM mit verschiedenen Probenvorbereitungstechniken untersucht, um ein besseres Verständnis der Smektitstrukturen und strukturellen Veränderungen zu erhalten. Es wurden verschiedene Methoden zur Entfernung von Kolloiden aus den extrahierten Lösungen getestet, da ersichtlich war, dass in einigen Proben das Vorhandensein von feinen Kolloidpartikeln die gemessene chemische Zusammensetzung verändert.

Die Herstellung von „reinem“ Smektit ( $< 1 \mu\text{m}$ , TS-1057-Bayern) und Begleitmineralen für die nächsten drei Batch-Reaktorversuche hat begonnen. Die akzessorischen Minerale Pyrit und Kalzit wurden von Hand gemahlen und die Korngrößen mittels Schwerkraftabscheidung in Ethanol, damit sich die Minerale nicht wie im ersten Experiment auflösen oder oxidieren, getrennt, um eine 4 bis  $100 \mu\text{m}$  große Fraktion zu erhalten. Die Herstellung reiner akzessorischer Minerale in einer bestimmten Größenfraktion ist sehr zeitaufwendig, und wir versuchen nun, sie für die kommenden Batch-Experimente in größeren Mengen herzustellen. Die Korngrößenverteilung dieser Begleitminerale wurde mit Hilfe der Elektronenmikroskopie analysiert. Es wurde ein „reiner“ Nontronit (Hedemünden) hergestellt, um die Veränderungen in Fe-reichen Smektiten unter Batch-Reaktorbedingungen zu untersuchen. Die Reinheit der Probe wurde mittels XRD und SEM überprüft. Die „reinen“ Nontronit- und Smektitproben wurden an die Leibniz Universität Hannover zur Mössbauer-Spektroskopie geschickt, um die Oxidationsstufen des Eisens zu analysieren. Nach der Vorbereitung der synthetischen Mineralmischungen und der entsprechenden Lösungen wurde in der 3. Juli-Woche ein zweites Batch-Reaktor-Experiment mit Nontronit gestartet, welches in der 3. August-Woche entnommen werden wird.

Außerdem haben wir Mikroben-Metall-Bentonit-Proben aus den HZDR-Experimenten (AP4) rasterelektronenmikroskopisch analysiert und werden dies auch weiterhin in monatlichen Abständen tun. Alle Ergebnisse wurden auf dem 3. UMB-II Workshop am 10.03.2022 in Greifswald diskutiert. Aufgrund weiterer Verzögerungen bei der GRS haben die Experimente des dritten Arbeitspakets (AP3: Monate 13-24) immer noch nicht begonnen. Aufgrund der durch die Pandemie verursachten Einschränkungen befinden wir uns 6 Monate hinter dem vorgesehenen Zeitplan.

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

Nach der Durchführung des zweiten Batch-Experiments im August 2022 werden die Proben mineralogisch und geochemisch mittels XRD, EDX-SEM und MP-AES analysiert. Danach folgen drei weitere Batch-Experimente die jeweils 4 Monate, einschließlich Vorbereitung, Experiment und Analysen, dauern werden. Wir warten noch auf die Proben des ersten Batch-Experiments von der GRS, um die mineralogischen und geochemischen Veränderungen zu untersuchen. Außerdem erwarten wir weitere Proben von den Mikroben-Bentonit-Metall-Kontaktflächen vom HZDR (Dresden), zur elektronenmikroskopischen Untersuchung.

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

Sudheer Kumar, R.; Warr, L.N.; Grathoff, G.; Kaufhold, S; Meleshyn, A (2022): Smectite Alteration in The Presence of Accessory Minerals (+/- K-oxalate): Experimental Constraints From 180 °C Batch Reactor Experiments (Poster), AIPEA - XVII International Clay Conference, Istanbul – Turkey 25-29 July 2022

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Technische Universität München, Arcisstr. 21, 80333 München		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11870D</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt D		
<b>Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit</b> Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte, Feld: 2.3		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.01.2021 bis 31.12.2023	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2022 bis 30.06.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 302.335,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Krüger	

### 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Das Untersuchungsprogramm umfasst folgende Arbeitspakete (AP):

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

Die zentralen Themen des Projektes sind die rechnerische Modellierung von Fe(II)-Substitutionen in Smektiten (AP2) in Abhängigkeit von Struktur, Ladung und anderer Substitutionen sowie die Abschätzung entsprechender Redoxpotentiale für Fe(II)/Fe(III). Weiterhin werden Fe(II)-Substitutionen in Oberflächen von Smektiten sowie die Sorption von Fe(II) an Oberflächen untersucht (AP3), um Fe(II) in Smektiten umfassend zu charakterisieren. Daneben ist vorgesehen, 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

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

Um die bevorzugte Anordnung von Na<sup>+</sup>-Gegenionen in der Zwischenschicht von Smektiten bestimmen zu können, wurden näherungsweise Rechnungen zur Abschätzung relativer Energien unternommen (AP1). Dazu wurden an Beispielen zweifach substituierter Smektite alle 28 möglichen Anordnungen zweier Na<sup>+</sup>-Zwischenschichtionen verglichen. Die geringen Energieunterschiede einer größeren Zahl von Na<sup>+</sup>-Anordnungen konnten dabei nicht mit den näherungsweise Rechnungen vorhergesagt und nur wenige ausgeschlossen werden. Insgesamt ergab sich, dass Anordnungen von zwei Na<sup>+</sup>-Zwischenschichtionen auf verschiedenen Seiten

der Smektitischicht mit geringem Abstand zu den Substitutionen vorteilhaft sind, womit sich die Suche nach einer optimalen Anordnung einschränken lässt.

Rechnungen zu oktaedrischen Eisensubstitutionen in Smektiten, insbesondere zu Fe(II)-Substitutionen, wurden fortgesetzt (AP2). Bereits weitgehend vollständige Modellierungen der Anordnung einer Fe(II)-Substitution in cis-vakantem Montmorillonit und zu zwei Fe(II)-Substitutionen in cis-vakantem Pyrophyllit wurden ergänzt. Hauptsächlich wurden entsprechende Rechnungen zu einer Fe(III)-Substitution in Montmorillonit, zu zwei Fe(III)-Substitutionen sowie einer Fe(II)- und einer Fe(III)-Substitution in Pyrophyllit durchgeführt, die als Grundlage zur Abschätzung von relativen Redoxpotentialen des Paares Fe(II)/Fe(III) in Pyrophyllit und Montmorillonit dienen. Hierbei wurden jeweils nächste bis drittnächste Nachbarpositionen der Substitutionen in einer  $2 \times 1 \times 1$ -Einheitszelle sowie Varianten der Verbrückung der Substitutionspaare und der Gitterpositionen betrachtet. In vielen Fällen konnten bereits optimale Positionen der  $\text{Na}^+$ -Zwischenschichtionen mit  $\text{Na}^+$ -M(II)-Abständen von etwa 430 pm gefunden werden. Vorläufige Ergebnisse bestätigen, dass die Variation der Energien in Abhängigkeit der Substitutionsabstände in Systemen mit Fe(III) geringer ausfallen als für zwei negativ geladene Substitutionen. Die geringste Variation von bis zu 7 kJ/mol wird für zwei Fe(III)-Substitutionen erhalten. Für Fe(III) in Montmorillonit ergeben sich mit bis zu 8 kJ/mol und in Pyrophyllit mit einer Fe(II)-Substitution mit bis zu etwa 10 kJ/mol geringfügig höhere Werte, die jeweils für benachbarte Substitutionen erreicht werden. Für alle Systeme mit einer Fe(III) und einer weiteren Substitution auf übernächsten Nachbarplätzen werden um 2-7 kJ/mol höhere Energien erhalten als für größere Substitutionsabstände. Diese Energieunterschiede entsprechen Effekten auf das Fe-Redoxpotential von bis zu -100 mV. Tendenziell kleiner fallen Energievariationen aufgrund verschiedener Gitterplätze im cis-vakanten Gitter aus, diese werden bisher jedoch noch nicht konsistent erhalten. Demgegenüber sind die Effekte benachbarter oder übernächster Paare von Fe(II)/M(II)-Substitutionen mit Energien von bis zu 57 kJ/mol und 30 kJ/mol wesentlich größer. Damit wird die Arbeitshypothese zur Größe verschiedener Effekte auf das Fe(II)/Fe(III)-Redoxpotential (Gitterplätze < oktaedr. Fe(III) < oktaedr. M(II)) bisher bestätigt. Derzeit werden für einzelne Strukturen die Positionen der  $\text{Na}^+$ -Zwischenschichtionen verbessert sowie insbesondere fehlende Varianten der Gitterpositionen ergänzt, um zu einem vollständigen und konsistenten Datensatz der Systeme mit Fe(II)-, Mg(II)- und Fe(III)-Substitutionen zu gelangen.

Geht man von einer zufälligen Verteilung von Fe(III)-Substitutionen in homogenen Smektiten mit typischem Eisengehalt aus, dann folgt aus den bisherigen Ergebnissen, dass es wenige leicht zu reduzierende Fe(III)-Substitutionen und mehr schwerer zu reduzierende gibt.

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

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

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

Keine.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Leibniz Universität Hannover, Welfengarten 1, 30167 Hannover		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11870E</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt E		
<b>Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit</b> Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte, Feld: 2.3		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.01.2021 bis 31.12.2023	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2022 bis 30.06.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 228.860,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> 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 CO<sub>2</sub>- Gasbildung durch eine teilweise bis vollständige Zersetzung der in Bentoniten vorhandenen Karbonate ablaufen kann. Im Projekt UMB-II sollen die beteiligten Reaktionsmechanismen aufgeklärt werden. Weitere Arbeitsschwerpunkte sind (i) die Abhängigkeit der Lösungsrate der Smektite vom Bentonit-Typ, (ii) der Einfluss der Fe(II)/Fe(III)-Redoxreaktion (experimenteller und quantenchemischer Ansatz), (iii) die Unterschiede in Korrosionsraten und –produkten an einer Eisen-Bentonit-Grenzfläche (mit Einsatz einer zu optimierenden Mößbauerspektroskopie) und (iv) der Einfluss der Bentonit-eigenen mikrobiellen Population.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1 & 2: Es wurden weiterhin Messungen an Bentonitmaterialien durchgeführt, um die Fe(II)/Fe(III) Verhältnisse unterschiedlicher Proben zu quantifizieren. In weiteren Testreihen wurden Messungen durchgeführt, welche den Einfluss der Eisen-Bentonit-Grenzfläche auf die Bildung der resultierenden Phasen untersuchen sollte. Dazu sind Bentonitproben mit Eisenpartikeln unterschiedlicher Größe ( $> 100 \mu\text{m}$ ,  $< 100 \mu\text{m}$ ) beladen worden. Die Ergebnisse legen nahe, dass die Größe der Grenzfläche nicht der entscheidende Faktor bei der Produktbildung ist.

AP3: Testmessungen mit dem Siliziumdriftdetektor (SDD) an Eisenfolie und Edelstahlfolie (hintereinander in Transmission) konnten deutliche Unterschiede in den Mößbauer-spektren in den verschiedenen Energiebereichen (6,4 keV bzw. 14,4 keV) zeigen. Durch die SDD-Verwendung wurden Testmessungen zur Elementanalyse ermöglicht und durchgeführt. Durch die deutlich bessere Energieauflösung lassen sich die Röntgenfluoreszenz-Signale Elementen zuordnen. Es wurden Verbesserungen der Auswerteeinheit erreicht, so dass es jetzt möglich ist Miniaturisierte Mößbauer Spektrometer (MIMOS) direkt damit zu betreiben, ohne separate Spannungsversorgung.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

AP1 & 2: Es sollen weitere Messungen für die beteiligten Projektteilnehmer durchgeführt werden. Explizit ist die Auswertung einer Messreihe geplant, welche über den Einfluss der Temperatur und des Wassergehalts auf die Bildung der Produktphase Aufschluss geben soll.

AP3: Es sind weitere Optimierungen im Bereich der Detektorelektronik sowie der Auswerteeinheit geplant. Diesbezüglich werden Zustandsregler und Zustandsbeobachter entwickelt 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 oder funktionalisiert ersetzt werden. Des Weiteren wird die Software der Auswerteeinheit optimiert, um eine schnellere Detektion einzelner Photonenergebnisse 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)

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Leibniz Universität Hannover, Welfengarten 1, 30167 Hannover		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11870F</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt F		
<b>Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit</b> Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte, Feld: 2.3		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.01.2021 bis 31.12.2023	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2022 bis 30.06.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 254.261,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Dultz	

### 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

In dem Vorhaben soll die Bewertung der Stabilität geotechnischer Bentonitbarrieren verbessert werden. Hierfür werden im Verbund mit weiteren Kooperationspartnern aufeinander abgestimmte experimentelle und analytische Arbeiten durchgeführt um ausgewählte Aspekte der Umwandlung von Bentonit im Kontakt mit Formationswässern der geologischen Barriere unter Endlagersystem-nahen Bedingungen zu untersuchen. Insbesondere wird die Auflösung von Carbonaten und CO<sub>2</sub>-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 CO<sub>2</sub>-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: Von der GRS wurden weitere Proben aus der Zeitreihe zu Umwandlungsreaktionen in zwei Bentoniten durch Carbonate sowie Fe(II) und S enthaltende Minerale nach 5000 h Exposition bei 120 °C und 2 bar erhalten. Für die vorgesehene tomographische Untersuchung der jetzt vorliegenden zusammen 16 Proben der Zeitreihe wurde Kontakt zu einer Messeinrichtung aufgenommen und die Aufnahmeparameter abgestimmt. Die Umsätze dieser Mineralreaktionen werden derzeit ergänzend nasschemisch für einen Versuchszeitraum von 50 Tagen unter Zusatz verschiedener Lösungen / eines Oxidationsmittels an drei Bentoniten bestimmt. Überdies wurde die *in situ* CO<sub>2</sub> Freisetzung aus Bentoniten in einer p/T Zelle durchgeführt und dabei simultan die zeitabhängige Zusammensetzung der Gasphase an einem FTIR-Spektrometer aufgenommen. Zur Verbesserung der Interpretation der erhaltenen Spektren wurde der Reaktionsumsatz durch Beimengung von CaCO<sub>3</sub> Nanopartikeln und FeS<sub>2</sub>-Pulver zu einem Ton erhöht.
- AP2: Voruntersuchungen ergaben, dass in Bentoniten verbreitet vorkommende Schwerminerale bis zu 15 % Fe(II) enthalten können. Zur Beschreibung der Quellen für die Entstehung von Azidität wurden daher die Schwerminerale in 5 Bentoniten mittels einer schweren Flüssigkeit (Dichte 2,9 g cm<sup>-3</sup>) abgetrennt. Hierfür wurde ein geeignetes Aufbereitungsverfahren

mit intensiver Dispergierung der Minerale und nachgelagerter Zentrifugation zur Erfassung insbesondere der feinkörnigen Anteile der Schwerminerale etabliert. Zur Verbesserung der röntgenographischen Bestimmung wurden stärker Fe-haltige Schwerminerale abgetrennt. Für die Bestimmung von Fe(II)/Fe<sub>gesamt</sub> können damit Leichtminerale und Schwerminerale, letztere getrennt in zwei Unterfraktionen, eingesetzt werden. Elektronenmikroskopische Untersuchungen ergaben mit Restsaumbildung und Zementierung angrenzender Tonminerale Hinweise auf einen verwitterungsbedingten Umsatz der Schwerminerale. Untersuchungen zur Textur ergaben, dass bei einigen Bentoniten der Anteil der Schluff- und Sandfraktion bei zusammen 30 % liegt. In Dünnschliffen der Sandfraktion konnten reaktive Mineralphasen wie Carbonate, Erzminerale und basaltisches Glas identifiziert und ihre Verwitterungsmorphologie beschrieben werden.

AP3: Keine Arbeiten im Berichtszeitraum.

AP4: Von HZDR wurden mikrobiell exponierte Metallplättchen erhalten und bezüglich der Benetzungseigenschaften und der Oberflächenrauheit untersucht. Das Vorliegen einer deutlichen Benetzungshemmung ist wesentlich auf Graphitpartikel in den Fe-Plättchen zurückzuführen. Nach Entfernung des anhaftenden Tons und der gebildeten Fe Oxide wurde eine Verringerung der Oberflächenrauheit im Vergleich zum ursprünglichen Zustand erhalten.

AP5: Zur Kennzeichnung der Veränderung der chemischen Stabilität von Smektit durch Adsorption von Fe-Ionen an den Kanten wurden zwei Bentonite in Laborversuchen (i) original, (ii) nach Entfernung der Fe Oxide und (iii) zusätzlicher Extraktion amorpher Kieselsäure, eingesetzt. Als Parameter für die Auflösung der Silicatschicht wurden die freigesetzten Si-Mengen quantifiziert. Neben der Untersuchung der Anlagerung von Fe<sup>3+</sup> wurde auch die von Al<sup>3+</sup> berücksichtigt. Die Proben wurden mit FeCl<sub>3</sub> bzw. AlCl<sub>3</sub> Lösungen in jeweils 5 Konzentrationen versetzt, gewaschen und die Si-Freisetzung in Zeitreihen bis zu 16 Tagen untersucht. Für einen Bentonit konnte dabei sowohl für das Angebot von Fe<sup>3+</sup> wie von Al<sup>3+</sup> eine erhebliche Reduktion der Si-Freisetzung im Vergleich zu Proben ohne Angebot dreiwertiger Kationen erhalten werden. Dies deutet einen Stabilitätsgewinn an. Bei der zweiten Tonprobe konnte dies nicht festgestellt werden, weil möglicherweise die Extraktion von amorphem Si nicht erschöpfend war.

#### 4. Geplante Weiterarbeiten

AP1: Durchführung tomographischer Untersuchungen und deren Auswertung. Fortführung der Versuche zur *in situ* CO<sub>2</sub> Freisetzung aus Bentoniten an einem FTIR-Spektrometer und insbesondere Interpretation der Spektren, Abstimmung mit GRS.

AP2: Quantifizierung von Schwer- und Leichtmineralen, Kennzeichnung des Fe-Oxidationsstatus und mineralogischer Zusammensetzung.

AP4: Fortsetzung zu Untersuchungen zur Metallkorrosion in Bentoniten mit/ohne mikrobiellen Einfluss. Proben werden vom HZDR erhalten.

AP5: Ausweitung des begonnenen Vorversuchs zur Erhöhung der chemischen Stabilität von Smektit durch Adsorption von Fe- und Al-Ionen an den Kantenflächen auf zusammen 5 Bentonite. Diskussion der Laborbefunde in Zusammenhang mit Ergebnissen kristallchemischer Modellierung (TUM).

#### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln	<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11880</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Sicherheitsrelevante Untersuchungen zur Bentonitaufsättigung (SIRUB)	
<b>Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit</b> Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte, Feld: 2.3	
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.04.2021 bis 31.12.2023	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2022 bis 30.06.2022
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 1.248.124,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Kröhn

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Bei der Durchführung des Vorhabens werden folgende Arbeitspakete bearbeitet:

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



### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Die vorbereitenden Arbeiten in AP1 verzögern sich aus zwei Gründen. Ein neuer geeigneter Anbieter für Infrarotkameras konnte zwar gefunden werden, die Auswahl an geeigneten Wellenlängen im IR-Spektrum zur sicheren Detektion von Wasser in Bentonit erfordert jedoch mehr Aufwand als erwartet. In mehreren Ortsterminen wurden Versuche zunächst mit Hilfe einer Multispektralbeleuchtung und dann einer Hyperspektralkamera durchgeführt. Mit letzterer konnte die Wassergehaltsverteilung in einer speziell angefertigten Probe bereits sichtbar gemacht werden. Mit Hilfe der dabei erzeugten Daten muss die Sensitivität auf bestimmte Wellenlängen jedoch noch optimiert werden.

Der beschaffte Keyence 3D-Scanner konnte die in den Datenblättern angegebene Genauigkeit bei weitem nicht erreichen. Daher wird zurzeit eine Rückabwicklung des Kaufs betrieben.

Für AP4 wurden Adsorptions- und Desorptionsisothermen von nunmehr 8 Proben von Bentoniten unterschiedlicher Herkunft, die im Rahmen des Projekts UMB (FKZ 02E 11344) akquiriert worden waren, ermittelt. Durch Vergleich mit den im Projekt BIGBEN (FKZ 02E 11284) ermittelten Hysteresekurven sind Dominanz von Na- bzw. Ca-Kationen in den Bentonitproben klar anhand der Kurvenformen erkennbar.

Die für AP5 geplante Zelle erwies sich auch bei einer verbesserten Konstruktion aufgrund der gedruckten Komponenten als nicht geeignet. Aus diesem Grund wurde von der ursprünglich geplanten sequenziellen Abarbeitung der Versuchsreihe abgerückt. Stattdessen werden die Versuche ab Juli 2022 mit bewährten Zellen aus dem Projekt AVET (FKZ 2E 11627) parallel durchgeführt.

Für AP6 konnten über die Task Force on Groundwater Flow and Solute Transport Daten für zusammengehörige, gegenüberliegende Kluftoberflächen beschafft werden. Dabei wurden jedoch einige Probleme offensichtlich. Zum Beispiel sind diese Oberflächen in den Daten nur vage zueinander ausgerichtet. Auch führen Ungenauigkeiten in den Scandaten zu Durchdringungen beim virtuellen Aufeinandersetzen der Oberflächen und verhindern dadurch eine korrekte Wiedergabe der Kluftweitenverteilungen im physikalischen Modell. Aus diesen und weiteren Erfahrungen heraus sollen besser eigene Scans mit höherer Auflösung unter kontrollierten Bedingungen erstellt werden.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Auswertung der Aufnahmen mit der Hyperspektralkamera zur Auswahl einer geeigneten Gerätekonfiguration für IR-Aufnahmen und Beschaffung (AP1)
- Neubeschaffung und Einrichtung eines 3D-Scanners (AP1)
- Anfertigung von Messzellen (AP1)
- Erstellung einer Korrelation zwischen dem Wassergehalt im Bentonit und den IR-Daten
- Beginn der Aufsättigungsversuche (AP2 und AP3)
- Fortsetzung der Isothermenmessungen (AP4)
- Beginn der Aufsättigungsversuche über Dampf (AP5)
- Gestaltung des Versuchsaufbaus für den Kontakt einer künstlichen Kluft mit kompaktiertem Bentonit (AP6)
- Kontaktaufnahme mit dem Untertagelabor Äspö zwecks In-situ-Datenakquisition von Kluftoberflächen

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<b>Auftragnehmer:</b> BGE Technology GmbH, Eschenstr. 55, 31224 Peine		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11890A</b>	
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Entwicklung und Test eines erweiterten Hoek-Brown Stoffmodells zur Berücksichtigung anisotropen Festigkeitsverhaltens bei der Anwendung der Integritätskriterien für kristalline Wirtsgesteine (BARIK), Teilprojekt A			
<b>Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit</b> Bereich C3: Sicherheitsnachweis, Feld: 3.1			
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.03.2021 bis 31.10.2023		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2022 bis 30.06.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 393.063,82 EUR		<b>Projektleiter:</b> Jobmann	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

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

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im Rahmen eines Präsenz- und mehrerer virtueller Treffen mit dem Verbundpartner Technische Universität Bergakademie Freiberg wurde der Fahrplan für die kontinuumsbasierte Entwicklung des Stoffmodells (BARIK-Stoffgesetz), die Implementierung für den Modellierungssoftware FLAC3D und das Testen des Konzepts für ein orthotrop elasto-plastische Stoffmodell mit Hoek-Brown-Versagenskriterium mit drei Schwächeflächensystemen festgelegt. Dieses erstellte Stoffmodell basiert auf dem Modell von Hoek und Brown (1980 und 2002). Der Grundgedanke des Hoek-Brown-Kriteriums besteht darin, von den Eigenschaften des intakten Gesteins (Matrix) auszugehen und Faktoren hinzuzufügen, die diese Eigenschaften infolge des Grads der Klüftigkeit im Gestein verringern. Das BARIK-Stoffgesetz soll das mechanische Verhalten der Gesteinsmatrix und bis zu drei expliziten Schwächeflächensystemen abbilden. Der anisotrope Einfluss wird durch die Schwächeflächensysteme hervorgerufen. Im Fokus des Stoffmodells stehen dann die realitätsnahe Abbildung des orthotrop-elasto-plastischen Verhaltens sowie das Erreichen von Grenzzuständen, welche zur Bewertung der Integrität der Barriere relevant sind.

Das orthotrop-elasto-plastische Stoffmodell mit Hoek-Brown-Versagenskriterium der Gesteinsmatrix wurde im Rahmen des AP1 erstellt und intern diskutiert. Nach der Implementierung des Ansatzes in das Computer-Programm FLAC3D wurden Tests zur Bewertung der korrekten Funktion durchgeführt. Diese Ergebnisse wurden intern vorgestellt und diskutiert.

Im Rahmen des AP2 wurde weiterhin das festgelegte Laborprogramm am Freiburger Gneis fortgeführt. Im Mittelpunkt standen die rein mechanischen Triaxialversuche in verschiedenen Winkelvariationen der Lasteinleitung zur Anisotropie-Ausrichtung und die Auswertung und Diskussion der bisherigen Ergebnisse.

Hinsichtlich der Arbeiten für das AP3 ist die Einarbeitung für die Implementierung des Stoffmodells in den Computercode OpenGeoSys abgeschlossen. Die Vorgehensweise für die Implementierung und Test der Stoffmodelle wurde entworfen und die Modelle für das Testen der Stoffmodelle in beiden Computercodes FLAC3D und OpenGeoSys festgelegt.

Eine kommentierte Literaturrecherche und die Dokumentation der ersten Reihe an Verifizierungsrechnungen wurden im Rahmen des AP5 erarbeitet.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Implementierung von drei Schwächeflächen in die verifizierte erste Stufe des BARIK-Stoffgesetzes sowohl in FLAC3D als auch in OpenGeoSys
- Fortsetzung der Verifizierungsrechnungen zum Hoek-Brown-Versagen in FLAC3D
- Dokumentation der Verifizierungsrechnungen zum Hoek-Brown-Versagen des BARIK-Stoffgesetzes
- Implementierung der hydro-mechanischen Kopplung und strain-softening-Funktionen in das BARIK-Stoffgesetz
- Fortsetzung der geplanten Laborversuche zur Charakterisierung des anisotropen Verhaltens von Gneis
- Vorbereitung der Veröffentlichung erster Ergebnisse des Forschungsvorhabens

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Technische Universität Bergakademie Freiberg, Akademiestr. 6, 09599 Freiberg		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11890B</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Entwicklung und Test eines erweiterten Hoek-Brown Stoffmodells zur Berücksichtigung anisotropen Festigkeitsverhaltens bei der Anwendung der Integritätskriterien für kristalline Wirtsgesteine (BARIK), Teilprojekt B		
<b>Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit</b> Bereich C3: Sicherheitsnachweis, Feld: 3.1		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.03.2021 bis 31.10.2023	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2022 bis 30.06.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 294.776,55 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Konietzky	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

AP1: Entwicklung Stoffmodell:

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

AP2: Laborversuche:

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

AP3: Implementierung und Test:

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

AP4: Evaluierung:

Evaluierung des Stoffgesetzes beim Einsatz als Dilatanzkriterium.

AP5: Dokumentation:

Zwischenzeitliche und abschließende Dokumentation aller Entwicklungen und Arbeiten sowie Datensicherung.

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

Erste Umsetzung des Konzepts und weitere Recherchen zum mechanischen Teil des Stoffgesetzes (AP1).

Dokumentation des erstellten Stoffgesetz-Konzeptes (AP5).

Erstellung und Implementierung eines orthotrop-elasto-plastischen Stoffgesetzes mit Hoek-Brown-Versagenskriterium der Gesteinsmatrix („erster Schritt des BARIK-Stoffgesetz“) (AP3).

Erstellung einer .dll-Datei zur Einbindung des ersten Teils des BARIK-Stoffgesetzes in die Software FLAC3D.

Anschließend Durchführung umfangreicher Verifizierungen des isotrop-elastischen und orthotrop-elastischen Verhaltens (zunächst ohne Hoek-Brown-Versagen) des ersten BARIK-Stoffgesetzes, an generischen Verifizierungsmodellen (Würfeln) in Form von Oedometer-Versuchen und einaxialen Druckversuchen jeweils mit unterschiedlichen Belastungsregimen und einer Vielzahl an Parametervariationen (Winkelvariation der Anisotropie-Ausrichtung). Umfassende Dokumentation der isotrop-elastischen und orthotrop-elastischen Verifizierungsrechnungen (AP5). Beginn der Entwicklung eines Verifizierungskonzeptes und der Verifizierungsrechnungen für das erste BARIK-Modell mit Hoek-Brown-Versagen.

Parallel weiteres Abarbeiten des festgelegten Laborprogrammes am Freiburger Gneis, vor allem der rein mechanischen Triaxialversuche in verschiedenen Winkelvariationen der Lasteinleitung zur Anisotropie-Ausrichtung inkl. Auswertung der bisherigen Ergebnisse (AP2).

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Weiterführen der Verifizierungsrechnungen zum Hoek-Brown-Versagen und anschließende Implementierung der bis zu drei Klüfte in die verifizierte erste Stufe des BARIK-Stoffgesetzes (AP3). Umfangreiche Dokumentation der Verifizierungsrechnungen zum Hoek-Brown-Versagen des ersten BARIK-Stoffgesetzes (AP5). Weitere Arbeiten zur Implementierung der hydro-mechanischen Kopplung und strain-softening-Funktionen in das BARIK Stoffgesetz.

Weitere Durchführung der geplanten Laborversuche zur Charakterisierung des anisotropen Verhaltens von Gneis.

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

Keine.

<b>Auftragnehmer:</b> BGE Technology GmbH, Eschenstr. 55, 31224 Peine		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11900</b>	
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Langzeitsicherheit von Verschlussystemen in Schächten und Rampen im Vergleich (LARYSSA)			
<b>Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit</b> Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte, Feld: 2.3			
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.06.2021 bis 31.05.2023		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2022 bis 30.06.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 479.325,30 EUR		<b>Projektleiter:</b> Herold	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP2: Für den Vergleich unterschiedlicher Verschlussysteme wurden Indikatoren mit relativ einfach zu ermittelnden Kennzahlen entwickelt. Die Indikatoren beziehen sich auf Eigenschaften der einzelnen Verschlusselemente bzw. des Verschlusses im Ganzen. Als Indikatoren wurden der hydraulische Widerstand, die Rückhaltefähigkeit und die Robustheit identifiziert.

Der hydraulische Widerstand eines Verschlusselementes kann für eine Flüssigkeit und der Annahme eines advektiven Flusses vereinfacht über die hydraulische Leitfähigkeit, den Querschnitt und die Druckdifferenz ermittelt werden. Die Summe der Einzelwiderstände ergibt den Gesamtwiderstand des Verschlussystems. Diese Zahl ist aber nur im Vergleich aussagekräftig. Eine Aussage über die Funktionsfähigkeit ist über die Umrechnung in eine theoretische Durchflusszeit möglich. Die Durchflusszeit muss hinreichend groß sein um über den jeweiligen Funktionszeitraum keinen Austritt des Fluides aus dem Verschluss stattfinden zu lassen.

Das Rückhaltevermögen eines Verschlusses kann über Sorptions- und Rückhalteigenschaften der verwendeten Verschlussmaterialien bestimmt werden. Für tonhaltige Baustoffe (z. B. Bentonit) ist eine Korrelation der Sorptionsfähigkeit mit dem Smektitanteil möglich. Verschlussysteme mit einem hohen Smektitanteil weisen tendenziell eine höhere Sorptionsfähigkeit auf. Diese sehr allgemeine Aussage berücksichtigt aber nicht die einzelnen Sorptionsprozesse und Nuklide sowie die geochemischen Randbedingungen. Ebenso ist dieser Ansatz nicht auf Betonbaustoffe anwendbar. Hier wirken zwar nicht die gleichen Sorptionsprozesse wie im Bentonit, ein Rückhaltevermögen des Zementsteins ist aber bekannt. Für die Erweiterung des Indikators „Rückhaltevermögen“ wurde eine Übersichtsmatrix entwickelt, um so eine Aussage über relevante/wirkende Rückhaltevorgänge im Zementstein unter verschiedenen geochemischen Randbedingungen treffen zu können.

Der Indikator Robustheit wird über drei Kennzahlen erfasst. Eine erste einfache Kennzahl beschreibt Redundanz und Diversität des Verschlusses, vom Zahlenwert 1 (einfach) bis 4 (diversitäre Redundanz in Aufbau und Material). Die Robustheit des Systems gegen den Ausfall einzelner Elemente (Sensitivität und Kompensationsfähigkeit) wird in zwei weiteren Kennzahlen beschrieben. Parallel zur Entwicklung der Indikatoren wurden Parameterstudien an den einzelnen Verschlussystemen durchgeführt. Im Vergleich weist die hydraulische Durchlässigkeit der Elemente bzw. Komponenten (Dichtkörper, Kontaktzone, ALZ) eine höhere Sensitivität auf. Die Länge der Dichtelemente ist demgegenüber weniger sensitiv. Besonders deutlich wird dies in Rampenverschlüssen. Hier kann der Gesamtwiderstand durch eine Maximierung der Länge nur begrenzt weiter erhöht werden.

AP3: Der Dichtheitsnachweis wird beispielhaft für ein Verschlusselement im Tongestein und Kristallin geführt. Zu diesem Zweck wurde ein numerisches Modell erstellt, das eine Parametrisierung der Streckenneigung erlaubt. Das Modell bildet die Basis für Variationsrechnungen mit denen unterschiedliche Bauausführungen (und die damit verbundenen unterschiedlichen Verschlusseigenschaften) verglichen werden.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

AP2: Die Anwendung der entwickelten Indikatoren auf die einzelnen Verschlussysteme wird weitergeführt. Den Schwerpunkt bildet der Indikator „Robustheit“.

AP3: Die Nachweisführung wird mit den erarbeiteten numerischen Modellen weitergeführt. Weitere Berechnungen sollen die Wirksamkeit von Schlitzten in unterschiedlichen Bauausführungen bewerten.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

P. Herold, M. Jobmann, P. Leon Vargas, V. Burlaka (2022): Assessment methods to compare the expected long-term performance of sealing elements (Poster), 8th ClayConference, 13.-16.06.2022, Nancy

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e. V., Bautzner Landstr. 400, 01328 Dresden		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11911A</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Vorhersage der heterogenen Radionuklidisorption auf Kluft- und Störungsflächen in granitischen Gesteinen: Parametrisierung und Validierung verbesserter reaktiver Transportmodelle (WTZ-Granit), Teilprojekt A		
<b>Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit</b> Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte, Feld: 2.3		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.04.2021 bis 31.03.2024	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2022 bis 30.06.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 253.632,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Fischer	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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



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

Die Doktorandenstelle in diesem Teilprojekt wurde zum Ende des letzten Berichtszeitraums besetzt. Die im Dez. 2021 ausgewählten computertomografischen (CT) Datensätze eines geklüfteten Granitgesteins (Granit von Soultz-sous-Forêts) wurden im Berichtszeitraum für Transportmodellierungen vorbereitet. Dazu wurden Arbeiten zur Segmentierung des Kluftporenraums durchgeführt, danach erfolgte der Import der Geometriedaten in die Modellierungssoftware COMSOL. Der Schwerpunkt der statistischen und numerischen Untersuchungen lag auf der fortgesetzten Analyse der Kluft-Topografie (Rauheit, Rauheitsparameter) und Kluft-Aperturweite, da deren Form und Rauheit für die Ausbildung von heterogenen Fließmustern bestimmend ist. Die Kluftweite liegt teilweise in der Größe der Ortsauflösung der CT-Daten, deshalb wurden Sensitivitätsstudien zum Einfluss von voxel-großen Veränderungen der Geometrie durchgeführt. Diese Arbeiten dienen der Vorbereitung des Einbindens von oberflächenmikroskopischen Daten (s. u.) in die optimierten Klufttopografien. 3D-Transportsimulationen unter Berücksichtigung der o. g. Parametervariationen wurden durchgeführt. Die Ergebnisse wurden über Durchbruchskurven analysiert und die Unterschiede der Form der Durchbruchskurven ausgewertet. Unterschiedliche Fließgeschwindigkeiten und unterschiedliche Einlass-/Auslasspositionen der Kluftbeschickung (punktförmige Ein- und Ausgänge in das Kluftvolumen) wurden systematisch bezüglich ihrer Auswirkungen auf die räumlichen Fließmuster numerisch untersucht.

Für neue CT-Untersuchungen wurden vier Kernproben (Lausitzer Granodiorit, Stbr. Königsbrück, Auftreten von Kluftmineralisationen und Alterationszonen) gemeinsam mit dem Projektpartner FSU Jena ausgewählt und die nachfolgenden Analyseschritte geplant. Erste CT-Daten für die Verwendung in einem Geometriemodell des Königsbrücker Materials liegen vor.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Die Segmentierung der CT-Daten (Königsbrück) ist einer der nächsten Arbeitsschritte. Die Analysen der Klufttopografie durch Oberflächenmikroskopie (Interferometrie, Konfokalmikroskopie) werden fortgesetzt. Diese Datensätze sollen zur Verfeinerung der segmentierten CT-Klufttopografie verwendet werden. Dazu müssen Möglichkeiten getestet werden, die unterschiedlich orts aufgelösten Topografie-Informationen zu einem Geometriemodell zu vereinen. Danach sind damit weitere Transportmodellierungen geplant, die mit den bisherigen Ergebnissen bzgl. der Fließheterogenitäten (lokalisierte Fließpfade) verglichen werden. Positronen-Emissions-Tomografie-Messungen des Flusses durch die Kluft sind zur Validierung der Ergebnisse der Transportmodellierungen geplant.

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

Keine.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Friedrich-Schiller-Universität Jena, Fürstengraben 1, 07743 Jena		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11911B</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Vorhersage der heterogenen Radionuklidsorption auf Kluft- und Störungsflächen in granitischen Gesteinen: Parametrisierung und Validierung verbesserter reaktiver Transportmodelle (WTZ-Granit), Teilprojekt B		
<b>Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit</b> Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte, Feld: 2.3		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.04.2021 bis 31.03.2024	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2022 bis 30.06.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 249.905,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Schäfer	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

## 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Die geochemische und petrographische Charakterisierung von Proben der Modell-Region im Lausitzer Granit wurde vorangetrieben. Dabei kamen vor allem Dünnschliffmikroskopie und ICP-MS/OES nach Totalaufschluss der aufgemahlten Proben zur Anwendung. Des Weiteren

wurden Röntgenfluoreszenz-Analysen sowie ergänzende Messungen zur Porenraumcharakterisierung durchgeführt (N<sub>2</sub>-Pyknometrie, He-Gas-Permeabilität). Auf Grund der zu erwartenden mehrmonatigen Versuchslaufzeiten wurde der Fokus der Arbeit auf die Vorbereitung der Sorptionsexperimente und die Durchführung nötiger Vorexperimente gelegt. In Batchversuchen wird das Lösungsverhalten von aufgemahlene Gesteinsproben verschiedener Alterationszonen in artifiziellen Regenwässern bis zur Annäherung an den Gleichgewichtszustand untersucht. Die Beobachtungen werden unterstützt durch geochemische Festphasenanalysen (Totalaufschluss ICP-MS/OES) sowie Oberflächenanalysen (BET- und REM-Messung) der aufgemahlene Granitoide.

Am 14. Februar fand ein virtuelles Treffen aller Projektpartner statt, gefolgt von bi- und trilateralem Austausch der Doktoranden. Ziel des Treffens war die Erarbeitung von Arbeitsabläufen zur Charakterisierung der Gesteinsproben um vergleichbare Datensätze für spätere Modellrechnungen bereit zu stellen. Des Weiteren wurden  $\mu$ CT-Messungen an Bohrkernen der russischen Projektpartner in Jena geplant, welche jedoch aufgrund des eingefrorenen wissenschaftlichen Austauschs mit Russland derzeit nicht weiterverfolgt werden. Da dies auch den geplanten Austausch von Probenmaterial betraf, wurde entschieden, Bohrkern aus der Region Beishan (China) als Vergleichsmaterial zu nutzen, um die im Laufe des Projektes erarbeiteten reaktiven Transportmodelle zu verifizieren. Entsprechende Bohrkern mit natürlichen Klüften und Kluftfüllungen stehen der FSU bereits aus dem ELF-China Pilot Projekt zur Verfügung (BMWK Förderkennzeichen 02E11850E). Am 1. März fand am HZDR Leipzig eine Projektbesprechung der Doktoranden statt. Dabei wurde das weitere Vorgehen sowie die Anwendung des am HZDR vorhandenen Konfokal Mikroskops und des Geo-PETs sowie weitere methodische Ansätze diskutiert. Im Laufe des Berichtszeitraums wurden Vorexperimente sowie der Ausblick auf aktuelle Arbeiten im Rahmen nationaler (FH-DGGV Tagung, online) und internationaler Konferenzen (RadChem 2022, Marianske Lazne, CZ) vorgestellt.

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

Für das zweite Halbjahr 2022 sind weiterführende Batch-Sorptionsexperimente an aufgemahlene Granitoiden sowie Einzelkornanalysen zum Sorptionsvermögen alterierter Feldspäte anhand von Dünnschliffen geplant. Die Sorptionsraten sollen orts aufgelöst mittels Laserablationsgestützter ICP-MS analysiert werden. Simultan dazu sollen erste Experimente zur Bestimmung der Matrixdiffusion unter anoxischen Bedingungen an Bohrkernmaterial durchgeführt werden. Durch die Priorisierung der Sorptionsexperimente wurde die Bestimmung der Oberflächenrauigkeit in nm- $\mu$ m Skala mittels Konfokalmikroskopie auf das zweite Halbjahr verschoben. Zeitgleich wird der im ersten Jahr des Projekts etablierte Arbeitsablauf zur Charakterisierung der Modell-Region Lausitzer Granit an Proben weiterer Standorte wiederholt (Meißner Granit, 2-Glimmer Granodiorit).

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

Kusturica, A., Van Laaten, N., Drake, H., 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

Kusturica A., Hupfer S., Schäfer T., Fischer, C. (in prep.): Surface roughness and pore space increase in response to different alteration stages of granitoid rocks based on combined CT and VSI analyses. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences*

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Forschungszentrum Jülich GmbH, Wilhelm-Johnen-Str., 52428 Jülich		<b>Förderkennzeichen:</b>  <b>02 E 11921A</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Untersuchungen zur SEParation von AMericium aus hochradioaktiven Abfalllösungen (SEPAM), Teilprojekt A		
<b>Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit</b> Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte, Feld: 2.1		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.04.2021 bis 31.03.2024	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2022 bis 30.06.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 254.678,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Modolo	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Das Projekt wird in vier Arbeitspaketen bearbeitet:

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

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Die Zusammenarbeit mit der Lomonossow-Universität wurde wegen des Krieges in der Ukraine eingestellt.

- AP1: In Zusammenarbeit mit der Universität Twente in den Niederlanden wurde eine Reihe von Diglykolamid-Analoga (Tetraoctyl- und Tetradecyl-DGA) mit zweifacher Substitution des Molekülrückgrats durch Propyl- und Ethylmethylketten mit verschiedenen Diastereomeren (anti und syn) getestet, um die Fähigkeit zur Komplexbildung und die Selektivität für Actiniden, Lanthaniden und andere Spaltprodukte zu beobachten. Die Ethyl-Methyl-Substitutionen in beiden Analoga zeigen die höchsten Verteilungsverhältnisse für dreiwertige Actinide und Lanthanide auf, und es ist möglich, den Oktadeffekt (erhöhte Stabilität der halbgefüllten f-Schale für Ln(III)-Ionen) zu beobachten. Die syn-Diastereomere weisen höhere Verteilungsverhältnisse auf als die anti-Diastereomere und folgen damit dem für Me<sub>2</sub>-TODGA gezeigten Trend. Trotz hoher HNO<sub>3</sub>-Konzentrationen wurde keine Bildung einer dritten Phase beobachtet. Hinsichtlich der Selektivität zeigten die meisten Liganden eine höhere Affinität für Am(III) als für Cm(III) oder Eu(III), unabhängig von der sterischen Orientierung. Für Pu(IV) wurden im Vergleich zu den dreiwertigen Ionen höhere Verteilungsverhältnisse beobachtet. Diese Erkenntnisse verbessern das grundlegende Verständnis der Koordinationschemie von Diglykolamid-Liganden mit drei- und vierwertigen Metallionen.
- AP2: Im Berichtszeitraum wurden keine Arbeiten durchgeführt.
- AP3: Im Berichtszeitraum wurden keine Arbeiten durchgeführt.
- AP4: Die neu eingestellte Doktorandin hat ihre ersten Extraktionsergebnisse auf mehreren internationalen Konferenzen präsentiert (vgl. Kapitel 5).

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Die Untersuchungen der Diastereomere von Diglykolamid-Analoga werden mit höheren Konzentrationen fortgesetzt. Neue hydrophile Komplexbildner aus der Klasse der Pyridin- und Bipyridin-Triazine werden getestet.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Diaz Gomez, L. J.; Wilden, A.; Modolo, G.; Gullo, M. C.; Verboom, W.: Screening of modified diglycolamide diastereomers to increase Am(III) selectivity during the partitioning of PUREX raffinate solution, 19th Radiochemical Conference (RadChem 2022), Mariánské Lázně, Czech Republic, 15-20 May, 2022. Vortrag

Diaz Gomez, L. J.; Wilden, A.; Modolo, G.; Gullo, M. C.; Verboom, W.: Screening of modified diglycolamide diastereomers to increase Am(III) selectivity during the partitioning of PUREX raffinate solution, Helmholtz Energy Young Scientists Workshop - Enabling cooperation and networks in energy, Frankfurt am Main, Germany, 30-31 May, 2022. Poster

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Hermann-von-Helmholtz-Platz 1, 76344 Eggenstein-Leopoldshafen		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11921B</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Untersuchungen zur SEParation von AMericium aus hochradioaktiven Abfalllösungen (SEPAM), Teilprojekt B		
<b>Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit</b> Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte, Feld: 2.1		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.04.2021 bis 31.03.2024	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2022 bis 30.06.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 250.000,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Geist	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP1: Grundlagen Koordinations- und Extraktionschemie

AP2: Prozessrelevante Optimierungen

AP3: Modellierung und Prozesstests

AP4: Nachwuchsförderung

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Für die Komplexierung von Cm(III) mit N-Donorliganden nach dem CHON-Prinzip lag der Fokus auf der Synthese von Bis-1,2,4-Triazolyl-pyridinen und Bis-Pyrazolyl-pyridinen. Ziel ist es, den Einfluss der Anzahl und Position der Stickstoffatome im Fünfring auf die Komplexierung von dreiwertigen Actinid- und Lanthanidionen zu untersuchen.

Die Synthese von Bis-1,2,4-triazolyl-pyridin gestaltet sich aufgrund der bisher geringen Selektivität der Reaktion des Säurechlorids mit Pyridin-2,6-bis(carboximidhydrazid) sowie der anschließenden Zyklisierung des Zwischenprodukts als schwierig. Aus diesem Grund konnten noch keine Vertreter dieser Substanzklasse hergestellt werden. Im Gegensatz dazu konnte ein Bis-Pyrazolyl-pyridin-Derivat (<sup>t</sup>Bu-C4-BPP) aus Pyridin-2,6-dicarbonsäure-dimethylester mit einer Ausbeute von 390 mg (46 %) synthetisiert werden. Zurzeit liegt der Fokus auf der Untersuchung von <sup>t</sup>Bu-C4-BPP mittels TRLFS mit Cm(III). Diese Untersuchungen werden in Methanol mit 1,5 Vol.-% Wasser durchgeführt und ergaben bisher die Bildung eines 1:1 Komplexes, der bereits bei einer Gesamtligandenkonzentration von  $1,01\text{E}-8$  mol/L gebildet wird. Bei höheren Konzentrationen im Bereich ab  $1,00\text{E}-4$  mol/L ist für die Bildung eines 1:2-Komplexes eine längere Äquilibrierungszeit von bis zu 3 Tagen beobachtbar. Aus diesem Grund ist die Untersuchung dieses Systems noch nicht abgeschlossen.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

AP1:

Die Untersuchung von <sup>t</sup>Bu-C4-BPP mittels TRLFS soll vervollständigt werden. Dies beinhaltet die Bestimmung der Stabilitätskonstanten der gebildeten 1:1, 1:2 und 1:3 Komplexe und eine vollständige Speziationsanalyse. Zudem sollen weitere TRLFS Untersuchungen mit Europium durchgeführt werden. Nach Abschluss der TRLFS Untersuchungen soll der Ligand auf seine Extraktionseigenschaften hin untersucht werden.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Rheinisch-Westfälische Technische Hochschule Aachen, Temp- lergraben 55, 52062 Aachen		<b>Förderkennzeichen:</b>  <b>02 E 11931</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Einfluss der thermischen Reife auf die gekoppelten hydro-mechanischen Eigenschaften niedrig-durchlässiger Tonsteine - Feld & Laborskala (Maturity)		
<b>Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit</b> Bereich C1: Standortauswahl, Feld: 1.2		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.07.2021 bis 30.06.2025	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2022 bis 30.06.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 1.299.689,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. 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 Gebiet 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**

Aktuell liegt das Projekt in der finalen Phase von AP1 und AP2. Es wurden alle Bohrlokationen festgelegt, die Verträge mit den Landeigentümern sowie die Anzeige bei den zuständigen Behörden sind abgeschlossen, ebenso wie die Untersuchung auf mögliche Kampfmittel in den Bohrgebieten. Der Auftrag für die Bohrarbeiten und die hydraulischen Tests wurde erteilt. Die Bohrarbeiten sowie hydraulischen Tests werden laut Plan an der ersten Lokation zwischen 11.07.2022 und 02.09.22 durchgeführt.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

In den kommenden Monaten werden die restlichen Bohrarbeiten durchgeführt, was zum Abschluss von AP1 und AP2 bis Anfang-Mitte 2023 führend wird. Währenddessen werden die Arbeiten zu AP3 und AP4 anlaufen.

Leider ist es aufgrund der aktuellen Weltlage zu Lieferengpässen bei dem Aufbau des neuen geomechanischen Labors gekommen. Die ersten Kerne können dennoch an bereits bestehenden Prüfgeräten getestet werden. Mit ersten Ergebnissen wird für Ende 2022 gerechnet.

### **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

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11941</b>	
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Wissenschaftliche Grundlagen zum Nachweis der Langzeitsicherheit von Endlagern (WiGru-9)			
<b>Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit</b> Bereich C3: Sicherheitsnachweis, Feld: 3.2			
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.05.2021 bis 30.09.2023		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2022 bis 30.06.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 1.113.891,65 EUR		<b>Projektleiter:</b> Dr. Noseck	

### 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

TA1: Bearbeitung grundlegender Aspekte

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

TA2: Bearbeitung von Schwerpunktthemen

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

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

TA1:

- Teilnahme am RWMC Meeting mit Bericht über den Status der IGSC und seiner Subgroups, Leitung der IGSC Core Group Treffen, Leitung des außerordentlichen IGSC-Treffens in

Bern und Teilnahme an der gemeinsamen Topical Session mit FSC zum Thema Uncertainties.

- Teilnahme an Sitzungen der IDKM und EGAR-Bureaus, an den Arbeitstreffen und am 2. Plenary Meeting von EGAR sowie am 2. IDKM Plenary Meeting mit Vorstellung der Arbeiten zum SER.
- Leitung des CRC Bureau Meetings (Online), Leitung von zwei Arbeitstreffen der deutschen CRC Mitglieder, Abstimmung des Program of Work (PoW) 2023 – 2024 unter den deutschen CRC Mitgliedern, Leitung und Durchführung des CRC-5 Plenary Meetings vom 27.-30.06.2022 in Dresden.

TA2:

- Fortsetzung weiterführender Arbeiten zur Analyse von Modellsystemen verschiedener Länder im Rahmen der gemeinsamen Aktivität zur Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse (JOSA); Anwendung verschiedener Methoden der Sensitivitätsanalyse auf komplexere Modellsysteme anderer Länder (USA, Spanien) und Interpretation von Ergebnissen; Abstimmung mit den Partnern in mehreren Video-Gesprächen.
- 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 5. Workshop DECOVALEX D-2023.
- Die thermisch-hydraulischen Formulierungen im Code VIPER konnten voll gekoppelt als eigenes Interface in COMSOL implementiert werden.
- Teilnahme am virtuellen Meeting der Task Force EBS im Februar 2022.
- Beschaffung einer Kamera nebst Beleuchtung und Einrichten eines Aufnahmeplatzes in einem geräumigen Klimaschrank für die Einfrierversuche.

#### 4. Geplante Weiterarbeiten

TA1:

- Teilnahme am RWMC Bureau Meeting, Leitung der IGSC Arbeitsgruppe TARGES zur Entwicklung der zukünftigen Arbeiten und des IGSC Plenary Meetings in Paris. Vorstellung der IGSC-Arbeiten auf der IHLRWM Konferenz in Phoenix.
- Teilnahme an Sitzungen der IDKM und EGAR-Bureaus, an den Arbeitstreffen von EGAR sowie an der 2. IDKM Topical Session.
- Ausarbeitung des CRC PoW 2023 – 2024, Vorbereitung des Questionnaires zu „Software and safety assessment tools“, Weiterführung der Arbeiten gemäß PoW.

TA2:

- Weiterführung der Analyse von Modellsystemen verschiedener Länder im Rahmen der gemeinsamen Aktivität zur Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse (JOSA). Durchführung weiterer Test-Analysen und Diskussion im internationalen Kreis.
- Weiterführung von Vergleichsrechnungen für ein Endlager im Salzgestein im internationalen Vorhaben DECOVALEX 2023. Teilnahme an virtuellen Meetings und am 6. Workshop DECOVALEX D-2023 in Albuquerque.
- Beginn der Einfrierversuche mit vereinfachten gedruckten Klüften.
- Teilnahme am nächsten Meeting der Task Force on EBS in Lund im September.
- Beginn der Modellrechnungen zur Talikbildung mit den realistischen Zustandsgleichungen aus dem Projekt HYMNE (FKZ 2E 11809 A).
- Teilnahme am Jahrestreffen der CatchNet-Gruppe in Stockholm im September.

#### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11951A</b>	
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Kompaktion von Salzgrus für den sicheren Einschluss - Phase 2 (KOMPASS II), Teilprojekt A			
<b>Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit</b> Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte, Feld: 2.3			
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.07.2021 bis 30.06.2023		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2022 bis 30.06.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 298.800,00 EUR		<b>Projektleiter:</b> Friedenberg	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

### AP1: Experimentelle Untersuchungen

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

### AP2: Mikrostrukturelle Untersuchungen

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

### AP3: Numerische Modellierung

In KOMPASS-I wurde ein systematischer Vergleich von Stoffmodellen für die Beschreibung des Salzgrusverhaltens erstellt. Ein erstes Benchmarking von 3 Triaxialversuchen, zeigte außerdem,

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

AP4: Dokumentation und Synthese

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

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

Im Berichtszeitraum fanden zwei Projektmeetings statt. Das erste musste aufgrund der Corona-Situation am 23. und 24. Februar 2022 virtuell stattfinden. Die Partner stellten die jeweiligen Bearbeitungsstände vor und es wurde trotz des Online-Formats angeregt diskutiert. Es war auch wieder der Kollege des SAVER-Projekts eingeladen, um ein Update über den aktuellen Stand der Arbeiten in dem Projekt zu geben.

Am 05.07.2022 konnte das zweite Projektmeeting des Jahres in Präsenz im Rahmen der SaltMechX in Utrecht stattfinden. Auch hier wurden wieder die aktuellen Arbeitsstände vorgestellt und über das weitere Vorgehen diskutiert.

Neben den Projektmeetings fanden außerdem Interim-Meetings in Expertengruppen statt. Eine Expertengruppe befasst sich mit den Mikrostrukturuntersuchungen und die Zweite mit der numerischen Simulation. Die Interim-Meetings werden genauso wie die Projekttreffen von der Projektkoordinatorin GRS organisiert.

Die Mikrostrukturexperten trafen sich im Berichtszeitraum am 02.02.2022 und am 30.03.2022 virtuell und diskutierten über das fachspezifische Vorgehen. Aus dieser Diskussion wuchs die Idee eines Mikrostruktur-Benchmarkings, welches zurzeit bearbeitet wird.

Die Experten für die numerische Simulation trafen sich im Berichtszeitraum am 20.04.2022. Hier wurde vor allem die Vorgehensweise bei der Bearbeitung des Demonstrators diskutiert und erste Ergebnisse ausgetauscht.

Die GRS als Projektkoordinatorin ist für die Organisation aller Meetings verantwortlich. Außerdem werden Arbeiten im Bereich der numerischen Simulation beigesteuert, welche im Berichtszeitraum vorrangig den Demonstrator betrafen.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Bearbeitung der einzelnen APs entsprechend der Vorhabenbeschreibung.

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

Das KOMPASS-II Projekt wurde im Rahmen der DAEF 2022 Konferenz als Poster vorgestellt und ein Abstract im Konferenzband veröffentlicht.

Außerdem wurde das Projekt auf der SaltMechX oral präsentiert und ein Beitrag im Konferenzband „The Mechanical Behaviour of Salt X“ veröffentlicht.

<b>Auftragnehmer:</b> BGE Technology GmbH, Eschenstr. 55, 31224 Peine		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11951B</b>	
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Kompaktion von Salzgrus für den sicheren Einschluss - Phase 2 (KOMPASS II), Teilprojekt B			
<b>Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit</b> Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte, Feld: 2.3			
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.07.2021 bis 30.06.2023		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2022 bis 30.06.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 263.890,83 EUR		<b>Projektleiter:</b> Lerch	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

### AP1: Experimentelle Untersuchungen

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

### AP2: Mikrostrukturelle Untersuchungen

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

**AP3: Numerische Modellierung**

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

**AP4: Dokumentation und Synthese**

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

**3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse**

Im Berichtszeitraum fanden am 23. und 24. Februar 2022 (virtuell) unter Beteiligung der Kollege des SAVER-Projekts) und am 05.07.2022 (in Präsenz) im Vorfeld der SaltMechX in Utrecht Projektmeetings statt. Darüber hinaus fand am 20. April 2022 (virtuell) ein Gruppenmeeting im Kreis der Teilnehmer des AP3 statt, um über den aktuellen Stand der Arbeiten und die zukünftigen Schritte in dem AP zu diskutieren.

Die BGE TEC-Arbeiten konzentrierten sich auf AP3. Die Programmierarbeiten zur Anwendung von R wurden fortgeführt. Erste Testrechnungen zeigen einen deutlichen Zeitvorteil gegenüber dem bisherigen Excel-Algorithmus. Die Implementierung des erweiterten Stoffmodellansatzes wurde fortgeführt. Mit Bezug zur SaltMechX zeigt sich, dass ein noch deutlich stärkerer Bezug zur Kornstruktur und zum Einfluss der Feuchte hergestellt werden muss. Da noch kein finaler Zustand im Stoffmodell erreicht wurde, sind die Berechnungen zum Demonstrator auf der Basis des bisherigen Ansatzes durchgeführt worden. Im Vergleich mit den Ergebnissen der Projektpartner zeigt sich jedoch insbesondere bei sehr kleiner Porosität eine substantiell verzögerte Kriechrate.

**4. Geplante Weiterarbeiten**

Bearbeitung der einzelnen APs entsprechend der Vorhabenbeschreibung.

**5. Berichte, Veröffentlichungen**

Das KOMPASS-II Projekt wurde im Rahmen der DAEF 2022 Konferenz als Poster vorgestellt und ein Abstract im Konferenzband veröffentlicht

Außerdem wurde das Projekt auf der SaltMechX oral präsentiert und ein Beitrag im Konferenzband „The Mechanical Behaviour of Salt X“ veröffentlicht

<b>Zuwendungsempfänger:</b> IfG Institut für Gebirgsmechanik GmbH, Friederikenstr. 60, 04279 Leipzig		<b>Förderkennzeichen:</b>  <b>02 E 11951C</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Kompaktion von Salzgrus für den sicheren Einschluss - Phase 2 (KOM-PASS II), Teilprojekt C		
<b>Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit</b> Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte, Feld: 2.3		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.07.2021 bis 30.06.2023	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2022 bis 30.06.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 286.215,20 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Popp	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP1: Experimentelle Untersuchungen

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

AP2: Mikrostrukturelle Untersuchungen

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

AP3: Numerische Modellierung

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

AP4: Dokumentation und Synthese

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



### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im Berichtszeitraum führten die Projektpartner drei Projekttreffen durch, wovon zwei Treffen virtuell durchgeführt wurden (24.2.2022 und 20.4.2022) und ein weiteres in Präsenz stattfand (5.7.2022 in Utrecht, Niederlande).

In AP1 wurde in der großen Versatzdruckzelle ein Wiederholungsversuch (PC-T4) mit befeuchtem Salzgrus durchgeführt. Das Material wurde unter einer nominellen Auflast schrittweise mit ca. 0,5 MPa; 2,0 MPa, 4,0 MPa und 8,0 MPa (je Laststufe 1 Woche Kriechzeit), d. h. bis ca. 4.500 kN definiert konsolidiert wurde, wobei insgesamt eine Endkompaktion von ca. 15 % erreicht wurde. Zur Überprüfung der Homogenität des Großprüfkörpers wurden für definierte Lagepunkte insgesamt 12 Einzelprüfkörper ( $d = 40$  mm,  $l = \text{ca. } 60 - 80$  mm) zur individuellen Bestimmung der Rohdichte, der Ultraschallgeschwindigkeiten ( $V_p$ ,  $V_s$ ) und dem Wassergehalt sowie der gaszugänglichen Porosität der getrockneten Proben hergestellt.

Weiterhin wurden drei isostatische Langzeitkriechversuche ( $s_{\text{iso}} = 5, 10$  und  $20$  MPa, Probengröße:  $d = 60$  mm,  $l = 120$  mm) begonnen, bei denen simultan die Gaspermeabilität gemessen wurde. Nach 40 Tagen wurden die Proben ausgebaut und mit 0,5 Gew.-% Wasser befeuchtet, wonach die Kriechraten sich drastisch erhöhten. Die Fertigstellung der zwei neuen Kompaktionszellen hat sich wegen der Lieferung von Zubehörteilen verzögert.

Für Mikrostrukturuntersuchungen in AP2 wurden repräsentative Prüfkörper aus dem oben beschriebenen Versatzdruckversuch (PC-T4) an BGR und SANDIA geschickt.

Für das AP3 betreut das IfG federführend die Weiterentwicklung des virtuellen Demonstrators. Er dient dazu, das zeitabhängige Kompaktionsverhalten von Salzgrus in einer konvergierenden, versetzten Strecke als ein generisches Anwendungsszenario zu modellieren. Nach Einigung auf eine Modellgeometrie setzte das IfG den Demonstrator als „plug-and-play“ Modell in der Simulationssoftware FLAC3D um und stellte ihn den Projektpartnern zusammen mit einer umfangreichen Dokumentation zur Verfügung. Damit ist sichergestellt, dass die Projektpartner mit eigener Simulationssoftware den Demonstrator baugleich umsetzen konnten.

Mit den KOMPASS II - Projektpartnern in der numerischen Modellierung wurde anschließend eine umfangreiche Kalibrierungsrechnung erfolgreich durchgeführt. Diese beinhaltete sowohl eine Konvergenzstudie für die Wahl der Vernetzung („mesh“) als auch die Modellierung der unversetzten Strecke. Damit ist die Vergleichbarkeit der modellierten Streckenkonvergenz sichergestellt, die letztlich für die Salzgruskompaktion verantwortlich ist. Zwei unterschiedliche Szenarien wurden für das Kriechverhalten des Wirtsgesteins berechnet: (1) das klassische BGRa Potenzgesetz; (2) ein zweigliedriges Potenzgesetz, das auch lineares Kriechen („Drucklösungskriechen“) bei geringen Differenzspannungen berücksichtigt. Das IfG übernahm hierbei die Kalibrierungsrechnungen für die FLAC3D Version des virtuellen Demonstrators. Im Laufe des zweiten Quartals 2022 konnten dann ein Großteil der Partner erste Modellierungen mit dem Demonstrator durchführen. Das IfG trug diese Ergebnisse zusammen und übernahm auch die Homogenisierung und Aufbereitung der Daten

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Bearbeitung der einzelnen APs entsprechend der Vorhabenbeschreibung.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Das KOMPASS-Projekt wurde im Rahmen der internationalen Konferenz „Mechanical Behavior of Salt X (SaltMech X), Utrecht (NL), 06.-08. Juli 2022, mit einem Vortrag vorgestellt und im Konferenzband als schriftlicher Beitrag veröffentlicht

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Technische Universität Clausthal, Adolph-Römer-Str. 2a, 38678 Clausthal-Zellerfeld		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11951D</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Kompaktion von Salzgrus für den sicheren Einschluss - Phase 2 (KOM-PASS II), Teilprojekt D		
<b>Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit</b> Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte, Feld: 2.3		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.07.2021 bis 30.06.2023	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2022 bis 30.06.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 307.503,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Düsterloh	

### 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Experimentelle Untersuchungen
- AP1.1: Weiterentwicklung der Vorkompaktionstechniken
- AP1.2: Demonstration der hydraulischen Integrität
- AP1.3: Durchführung von Langzeit-Kompaktionsversuchen
- AP2: 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
- AP3: 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
- AP4: Dokumentation und Synthese

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP1.1: Weiterentwicklung der Vorkompaktionstechniken
  - Vorkompaktierte Probe KOM21 (erstellt im Rahmen von KOMPASS I) mit  $w = 1\%$  an Projektpartner SANDIA und BGR für mikrostrukturelle Untersuchungen versendet.
  - Fortsetzung von systematischen Untersuchungsreihen – Versuchsserie mit Variation der Versuchsdauer bei gleichbleibenden Belastungsbedingungen und Feuchtegehalt sowie Versuchsserie mit Variation des Feuchtegehaltes bei gleichbleibenden Belastungsbedingungen und Versuchsdauer.
- AP1.2: Demonstration der hydraulischen Integrität
  - Untersuchung des Permeabilitätsverhaltens der langzeitkompaktierten Proben TK-033 und TK-031 von BGR sowie des Prüfkörpers TUC-V2 von TUC.

**AP1.3: Durchführung von Langzeit-Kompaktionsversuchen**

- Endauswertung des Langzeitkompaktionsversuchs TUC-V2 und Übergabe der Messdaten an Projektpartner zur Verwendung für Benchmark-Analysen.
- Durchführung eines weiteren Langzeitkompaktionsversuchs TUC-V4 mit variierten deviatorischen Belastungsniveaus. Zielsetzung: Feststellung/Konkretisierung der funktionalen Abhängigkeit des Kompaktionsverhaltens vom Niveau der deviatorischen Beanspruchung.

**AP3.2: Modellentwicklung und – Optimierung**

- Implementierung des neuen Stoffmodells in eine für FLAC3D 7.0 geeignete cpp-Datei.
- Erweiterung des Ansatzes für die Abhängigkeit des Kompaktionsverhaltens von der Porosität zur Erhöhung der numerischen Stabilität der Simulationen für den Demonstrator (betreffend Anfangsbereich mit hoher Porosität).

**AP3.3: Demonstrator**

Variationsanalysen für eine verfüllte Strecke mit den aus dem Versuch TK-031 ermittelten Materialparametern:

- Variation des Kriechansatzes: one power (=BGRa) und two power (realitätsnäher);
- Variation der Kriechparameter: two power mit Original-Parametern (Vorschlag IfG) und mit F10 herabgesetzten Parametern für den unteren Bereich der deviatorischen Beanspruchungen (unter 8MPa);
- Variation der Kriechparameterkombination Salzgrus-Steinsalz.

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

- Analyse Demonstratorberechnungen hinsichtlich Plausibilität der Berechnungsergebnisse insbesondere nach Erreichen der Vollkompaktion: Prüfung ob berechnetes Spannungsniveau = Primärspannungsniveau; Spannungsgeometrie = isotrop; Endporosität Salzgruß = Steinsalzporosität.

**4. Geplante Weiterarbeiten****AP1.1: Weiterentwicklung der Vorkompaktionstechniken**

- Fortsetzung von systematischen Untersuchungsreihen mit Variation der Steuerungsparameter in der Vorkompaktion zur Herstellung von Prüfkörpern für weitere mikrostrukturelle Untersuchungen (Probe mit  $w = 0.1\%$  für BGR) und Langzeitkompaktionsversuche.

**AP1.2: Demonstration der hydraulischen Integrität**

- Auswertung der drei 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**

- Auswertung des Langzeitkompaktionsversuchs TUC-V4 und Übergabe der Messdaten an Projektpartner.
- Durchführung eines weiteren Langzeitkompaktionsversuchs TUC-V5 für den Bereich höherer Porositäten (→ Vorkompaktion in der Triaxialzelle). Zielsetzung: Feststellung des Verhaltens von Salzgrus für das Material KOMPASS II im Bereich hoher Porosität; Überprüfung/Validierung des erweiterten Ansatzes von TUC EXPO-COM in Variante V-2022 (mit einer Zusatzfunktion in der Abhängigkeit des Kompaktionsverhaltens von der Porosität für den Bereich größerer Porositäten).

**AP3.1: Benchmark-Berechnungen auf Basis der Laborexperimente**

- Nachrechnung des Versuchs TUC-V2 Phasen 1 bis 5 zur Validierung und zur Demonstration der Leistungsfähigkeit des neuen Stoffmodells.
- Vergleichende Analyse der Berechnungsergebnisse der Verbundpartner.

**AP3.3: Demonstrator**

- Variationsanalysen für verfüllte Strecke mit Variation einiger wesentlicher Einflussparameter, wie z. B. des Parametersatzes (KOMPASS-Material, aus TUC-V2 abgeleitet), des Feuchtegehaltes, der Teufe der Strecke und der Temperatur.

**5. Berichte, Veröffentlichungen**

SaltMech-X. U. Düsterloh, U., Lerche, S., Saruulbayar, N.: Crushed salt compaction - a new approach for lab test analysis, physical modelling and numerical simulation. Part 1: Development and validation, 05.-07.07.2022, Utrecht

SaltMech-X. U. Düsterloh, U., Lerche, S., Saruulbayar, N.: Crushed salt compaction - a new approach for lab test analysis, physical modelling and numerical simulation. Part 2: Numerical application, 05.-07.07.2022, Utrecht

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Technische Universität Bergakademie Freiberg, Akademiestr. 6, 09599 Freiberg		<b>Förderkennzeichen:</b>  <b>02 E 11961</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Entwicklung eines Salzgrusbasierten Versatzkonzepts unter der Option Rückholbarkeit - Phase 1 (SAVER)		
<b>Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit</b> Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte, Feld: 2.2		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.07.2021 bis 30.06.2023	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2022 bis 30.06.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 554.503,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Mischo	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP1: Versuchskonzeption

AP1.1: Messkonzept für ein Langzeitmonitoring

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

AP1.3: Entwicklung einer geeigneten Behälterattrappe

AP2: Geochemie

AP2.1: Qualitätssicherungssystem für die Ausgangsmaterialien

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

AP3: Untertageversuche

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

AP3.2: Versatzkörper aus verbessertem GESAV-Material

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1: Das Messkonzept wurde an GESAV II orientiert und zum größten Teil übernommen. (AP1.1). Die Feuchtigkeitsmesssensoren wurde mit Hilfe des Herstellers auf alle drei zu verwendenden Materialien (GESAV-Material, KOMPASS-Material, qualifizierter Salzgrus) kalibriert. Der Einbau des Messequipments in der Grube Sondershausen ist bis auf Restarbeiten abgeschlossen (AP1.2). Auf Grund der technologisch nötigen Entscheidung, die Querschläge zu verlängern musste das bereits eingebaute Messequipment für die Sprengung wieder zurückgebaut und anschließend erneut eingebaut werden. Für die Attrappe des POLLUX-Behälters wurden Vortriebsrohre von der Firma HOBAS bezogen. Diese entsprechen vom Durchmesser den POLLUX-Behältern und bieten ausreichende Stabilität, um als Dummies zu fungieren (AP1.3). Durch den starken Anstieg der Kosten der Salzbinderkomponenten mussten die Versatzkörper insgesamt angepasst werden. Dadurch weisen die Attrappen jeweils eine Länge von 2,5 m auf im Vergleich um 5 bis 6 m langen Original. Dies ist jedoch nicht einschränkend, da trotzdem noch repräsentativ untersucht werden kann, wie die Druckverteilung und Wechselwirkung zwischen POLLUX-Attrappe und umliegenden Versatzkörper ist. Zudem kann die GSES GmbH nur Teile bis 1,3 m Durchmesser und 2,5 m Länge einfördern ohne Beeinflussung des Regelbetriebes. Dies hätte andernfalls sehr hohe Kosten zusätzlich nach sich gezogen. Das Konzept wurde mit BGE sowie involvierten Projektpartnern besprochen. Die Attrappen wurden hinsichtlich ihrer Länge zugeschnitten und zu den untertägigen Versuchsorten transportiert.

AP2: Von den bis dato angelieferten Salzbinderkomponenten (Kaliumsulfat) wurden Proben genommen, welche aktuell hinsichtlich Qualität und Reinheit untersucht werden. Die restlichen Salzbinderkomponenten (Beta-Halbhydrat, Magnesiumchloridlauge) sind bestellt, aber noch nicht geliefert (AP2.1). Eine Notwendigkeit der Anpassung bzw. Verbesserung der GESAV-Rezeptur wurde bereits im letzten Zwischenbericht ausgeschlossen (AP2.2).

### 4. Geplante Weiterarbeiten

AP1: Sobald es möglich ist, werden die restlichen Messinstrumente in die verlängerten Querschläge eingebaut (AP1.1). Die GSES GmbH muss momentan nochmals die Sohle fräsen, da die Sprengung nicht exakt genug war in einem der Versuchsorte. Nach dem Platzieren der POLLUX-Attrappen (AP1.3) kann anschließend der Einbau der beiden Versatzbauwerke beginnen (AP1.2). Durch Rückholung der Attrappen kann zudem eine mögliche Wechselwirkung zwischen den Versatzmaterialien und dem Attrappenwerkstoff (Glasfaserverstärkter Kunststoff) untersucht werden.

AP2: Es werden Rückstellproben vor Erstellung der Versatzkörper hergestellt. Eingangsuntersuchungen aller noch zu liefernden Materialien werden durchgeführt. Die Versatzkörper werden nach Herstellung kontinuierlich in regelmäßigen Abständen beprobt und geochemisch analysiert (AP2.1).

AP3: Die Versatzkörperherstellung aus KOMPASS-Salzgrus und GESAV wird begonnen sobald die messtechnische Einrichtung der Versuchsorte abgeschlossen sowie die Platzierung der POLLUX-Attrappen erfolgt ist und die restlichen Salzbinderkomponenten geliefert wurden (AP3.1, AP3.2).

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Vorstellung SAVER-Projekte auf KOMPASS-II-Kick-Off und bei US/German Workshop  
Präsentation über Stand der Zusammenarbeit von SAVER und KOMPASS auf KOMPASS-II-Workshop

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Technische Universität Bergakademie Freiberg, Akademiestr. 6, 09599 Freiberg		<b>Förderkennzeichen:</b>  <b>02 E 11971A</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Anwendbarkeit von Niedertemperatur-Salzschmelzen für Verschlussmaßnahmen von Endlagern für radioaktiver Abfälle im Wirtsgestein Salz (SalVE), Teilprojekt A		
<b>Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit</b> Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte, Feld: 2.2+2.3		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.08.2021 bis 31.01.2024	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2022 bis 30.06.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 457.118,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Freyer	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

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

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP2: Die Datenzusammenstellung, in welcher die Auswahl von 26 SSS mit Schmelzpunkten bis 200 °C aus der Literatur begründet und hinsichtlich ihrer Schmelzdiagramme, Schmelzpunkte, Dichte, Schmelzenthalpie, spez. Wärmekapazität, Wärmeleitfähigkeit, Viskosität und chem. Reaktionsfähigkeit betrachtet werden, wurde vervollständigt. Die potentiell relevanten SSS lassen sich in folgende Gruppen einteilen: Binäre und ternäre Mischungen von Alkalimetallchloriden mit  $\text{AlCl}_3$ , Mischungen mit  $\text{AlBr}_3$ , Mischungen von Alkalisulfiden mit Schwefel und Mischungen von Alkalimetallchloriden mit  $\text{CuCl}$ .
- AP4: Es wurden Auswahlkriterien zur Bewertung der in AP2 zusammengestellten SSS hergeleitet und angewendet. Im Ergebnis werden die beiden binären Systeme  $\text{NaCl} - \text{AlCl}_3$  sowie  $\text{KCl} - \text{CuCl}$  favorisiert.  
Konkret erfolgen experimentelle Untersuchungen mit den Salzschnmelzenmischungen  $\text{NaCl}$  (50,5 mol %) -  $\text{AlCl}_3$  (49,5 mol %) und  $\text{KCl}$  (34 mol %) –  $\text{CuCl}$  (66 mol %).
- AP6: Für die  $\text{NaCl} - \text{AlCl}_3$  – Schmelzmischung wurde eine standardisierte Prozedur zur Prüfkörperherstellung entwickelt. Geomechanische Untersuchungen der Prüfkörper zeigen die Notwendigkeit der Modifizierung der Schmelze für die Eignung als Versatzmaterial, insb. aufgrund der geringen Festigkeit und hohen Porosität. Mit der Befüllung von Bohrlöchern in einem Steinsalzblock konnte optisch ein gutes Anbindeverhalten der erstarrten Schmelze zum Steinsalz festgestellt werden. Weiterhin wurde das Verhalten der erstarrten Schmelze gegenüber  $\text{NaCl}$ -gesättigter Lösungen untersucht. An der Grenzfläche kristallisiert  $\text{NaCl}$  und  $\text{AlCl}_3 \cdot \text{H}_2\text{O}$ . Die durchgeführten Versuche liefern Hinweise, dass diese Grenzschicht die erstarrte Schmelze vor weiterer Umlösung isoliert.  
Mit der  $\text{KCl} - \text{CuCl} - \text{Schmelze}$  wurden erste Handhabungsversuche durchgeführt.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1: Ableitung nachzuweisender Eigenschaften und Entwicklung eines Grobkonzepts zur geotechnischen Nachweisführung für den modellbasierten Beleg der Funktionsfähigkeit (IfG) in Abstimmung mit BGE TECHNOLOGY. Formulierung des Verbesserungspotentials durch den Einsatz von Salzschnmelzen an den identifizierten Lokationen gegenüber anderen Materialien.
- AP3: Szenarien ableitung zur Temperaturentwicklung am Einsatzort und zu thermomechanischen Einwirkungen auf Verfüllbereiche sowie an Kontaktbereichen Schmelze/Salz/Abschlusspfropfen (IfG).
- AP4: Weiterführung der exp. Untersuchungen an den favorisierten Salzschnmelzensystemen ( $\text{NaCl} - \text{AlCl}_3$ ,  $\text{KCl} - \text{CuCl}$ ).
- AP5: Konkretisierung der Ideenskizze zur Einbringung von Salzschnmelzen in Schacht- und Streckenverschlüssen (IfG) in Zusammenarbeit mit der BGE TECHNOLOGY.
- AP6: Für die  $\text{NaCl} - \text{AlCl}_3$  – Schmelze liegt der Fokus auf der Optimierung der geomechanischen Eigenschaften durch Kombination mit Salzgrus. Außerdem sind weitere experimentelle Untersuchungen zum Anbindeverhalten zu Steinsalz und zum Verhalten gegenüber Salzlösungen sowie kristallwasserhaltiger Phasen ( $\text{MgO}$ -Baustoff, GESAV-Material) geplant. Für das System  $\text{CuCl} - \text{KCl}$  ist die Herstellung und Charakterisierung kleinerer Prüfkörper vorgesehen.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Konferenzbeitrag: Keller, Andreas. Molten salts as alternative sealing materials for repositories in rock salt - Overview of the project SALVE. In: Webinar Backfilling Technologies, Trans-European Centre Limited, 28.01.2022

<b>Auftragnehmer:</b> BGE Technology GmbH, Eschenstr. 55, 31224 Peine		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11971B</b>	
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Anwendbarkeit von Niedertemperatur-Salzschmelzen für Verschlussmaßnahmen von Endlagern für radioaktiver Abfälle im Wirtsgestein Salz (SalVE), Teilprojekt B			
<b>Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit</b> Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte, Feld: 2.2+2.3			
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.08.2021 bis 31.01.2024		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2022 bis 30.06.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 119.416,50 EUR		<b>Projektleiter:</b> Herold	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Hauptziel des Vorhabens besteht darin, die Möglichkeit einer Anwendung von Salzschmelzensystemen (SSS) für V11849erschlusskomponenten in einem Endlager in Steinsalz zu prüfen und ggf. konkrete Konzepte dafür herzuleiten. Der Einsatz ist in Bezug auf die Betriebsphase, eine eventuelle Rückholung, und den langzeitlichen, sicheren Einschluss zu prüfen, aber auch übergreifend zu betrachten. Als Teilziele folgen daraus: Anforderungen an die SSS sind zu formulieren und bekannte Vertreter hinsichtlich ihrer Eignung zu bewerten. Mit Hilfe von Versuchen im Liter-Maßstab sind Verarbeitungs-, Erstarrungs- und Reaktionsverhalten zu untersuchen sowie ein Einbringkonzept für den untertägigen Einsatz zu entwickeln. Abschließend sind Planungshinweise für eventuelle weitergehende Demonstrationsversuche zu formulieren.

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

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

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



### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im zweiten Berichtszeitraum fanden zwei Projektgespräche statt.

- AP1: Die grundlegenden Anforderungen und Randbedingungen an Verschlussmaßnahmen durch SSS wurden in einem Berichtsentwurf dokumentiert. Dazu gehören die grundsätzlichen Einsatzmöglichkeiten der SSS innerhalb der essentiellen Abdichtbauwerke zwischen Einlagerungsfeld und Infrastrukturbereich, in den Tageszugängen an der Grenze des Wirtsgesteins und als Verschluss von Bohrlöchern. Sie können z. B. als Vollmaterial mit großem Volumen, in dünnen Schichten bzw. zur Qualifizierung von schüttgutartigen Baustoffen verwendet werden. Die bergbauliche Zulassung auf Basis verschiedener Gesetze wurde zusammengefasst. Sowohl die Stoffe, als auch deren Verwendung sind einzubeziehen. Daher wird die Zulassungsfähigkeit auch technisch getrieben – was dessen Konzeption zumindest teilweise unabhängig vom Stoff macht. Grundsätzlich bieten sich geschlossene Systeme bzw. zielgenaue Bewetterungsmaßnahmen an. Weiterhin erfolgte eine Zusammenfassung der bekannten Verschlussbaustoffe in Salzlagerstätten zur Ableitung vorläufiger Anforderungen an die bevorzugten Eigenschaften der SSS.
- AP8: Erstellung einer Berichtsgliederung auf Basis der Vorhabensbeschreibung und Umsetzung als Berichtsentwurf mit dem Projektpartner.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1: Formulierung des Verbesserungspotentials durch den Einsatz von Salzschnmelzen an den identifizierten Lokationen gegenüber anderen Materialien. Ableitung der in einem Grobkonzept zur geotechnischen Nachweisführung für den modellbasierten Beleg der Funktionsfähigkeit (IfG) nachzuweisenden Eigenschaften, aus den bevorzugten Eigenschaften der SSS in Abstimmung mit IfG.
- AP3: Kurzbeschreibung der ausgewählten technischen Endlagerkonzepte für steile und flache Lagerung aus RESUS S1 und S2 inkl. der geologischen Situation, Endlagerauslegung und der Verschlusskonzepte. Detaillierte Beschreibung der vorgesehenen Einsatzorte bezüglich Geometrie, Bewetterung und Entfernungen zur Tagesoberfläche bzw. zu der Gestalt des Endlagers zu diesen Zeitpunkten. Unterstützung bei der Definition von Gesteinsparametern für die Ableitung von Szenarien der Temperaturentwicklungen von SSS im Einsatz.
- AP5: Prüfung der Zulassungsfähigkeit in Anbetracht der Kombination aus SSS und Verwendung. Variantenstudie zur Positionierung des Schmelzofens (über Tage/unter Tage) und zum Transport der Schmelze bzw. ihrer Komponenten aufbauend auf der Ideenskizze zur Einbringung in Zusammenarbeit mit der TU Bergakademie Freiberg. Recherche am Markt vorhandener und bereits umgesetzter Lösungen für konkrete Fälle. Variantenstudie zur Einbringtechnologie. Besuch des Endlagers Morsleben zur Sammlung von Betriebserfahrungen mit heißen Flüssigkeiten untertage bzw. Rohrleitungssystemen mit großer Förderhöhe.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Konferenzbeitrag: Keller, Andreas. Molten salts as alternative sealing materials for repositories in rock salt - Overview of the project SALVE. In: Webinar Backfilling Technologies, Transeuropean Centre Limited, 28.01.2022

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11981A</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Implementierung eines Monitoringsystems zur Evaluierung der Korrosionsvorgänge an Behältermaterialien in Bentonit-basierten Endlagerkonzepten (IMKORB), Teilprojekt A		
<b>Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit</b> Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte, Feld: 2.4		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.08.2021 bis 31.07.2022	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2022 bis 30.06.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 127.129,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Munöz	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

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

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Im Einzelnen werden folgende Teilziele verfolgt:

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

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Die Korrosionskinetik von Kugelgraphitstahl GGG40 wurde in Porenwasser mittels Polarisationskurven und elektrochemischer Impedanzspektroskopie in Opalinuston-Wasser bei pH-Werten von 7,6, 9 und 11 und in einer anaeroben Atmosphäre unter Drücken von 5 und 100 bar bei 30 °C weiter untersucht.

Impedanz-Spektren wurden bei 48-Stunden-Korrosionsversuchen in regelmäßigen Zeitabständen aufgenommen, wobei der zeitliche Verlauf des Korrosionspotentials gemessen wurde. Diese Experimente wurden mit der Messung von Stromtransienten auf Anlegen von Potentialpulsen ergänzt. Die Ergebnisse deuten auf einen Auflösungsmechanismus durch ein hydriertes Eisenoxid hin. Die Oxidschicht löst sich gleichzeitig an der Grenzfläche zum Elektrolyten. Die gegenseitige Wasserreduktion, findet an der Oxid-Elektrolyt-Grenzfläche statt. REM-EDX Analyse der korrodierten Oberfläche zeigen, dass die Korrosion die unterschiedlichen Stahlphasen, wie etwas Zementit, Perlit, Ferrit und die Graphitkugel durch ihre unterschiedlichen Korrosionsgeschwindigkeiten erkennen lässt. Mittels der Entfaltung von XPS-Spektren konnte man feststellen, dass das Oxid Silikate enthält, die durch Oxidation des im Stahl befindenden Siliziums entstehen. Eisen-Oxid-Silikate sind als Mikrometer-große Strukturen auf REM-Aufnahmen des korrodierten Stahls zu erkennen. Eine Art Abblätterung der Graphitkugel kann man auch beobachten. Dieser Effekt ist stärker unter hohen Drücken und entsteht möglicherweise durch Eindiffundieren von Wasserstoff aus der Wasserreduktion.

Das erste einer geplanten Reihe von Langzeit-Korrosionsexperimenten (4 Monate) mit GGG40 in Kontakt mit gesättigtem Bentonit bei 30 °C wurde mittels einer Bentonit-Zelle vollzogen. Schwerpunkt bei diesem Experiment ist die Beobachtung der Korrosionsentwicklung in einem mit Sauerstoff untergesättigten, leicht gepressten Bentonit-Porenwasser-Suspension, was den ersten Stadien der Korrosion in Ton-Endlager-Konzepten entsprechen soll. Der zeitliche Verlauf des Korrosionspotentials und der Korrosionskinetik wurden gemessen. Diesen letzten wurde Impedanzspektroskopie in regelmäßigen Abständen durchgeführt. Die Proben wurden aus dem Reaktor entfernt und zur Analyse mittels REM-EDX, XPS und TEM-Mikroskopie am KIT weitergeleitet.

Die Tauglichkeit eines Pt-Miniatur-Sensors in der Nähe der Korrodierten Oberfläche wurde gleichzeitig bei diesem Experiment geprüft.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Durchführung von Polarisationskurven von GGG40 in einer Bentonit-Zelle für die Bestimmung der kinetischen Parameter der anodischen Auflösung. Diese werden zur Berechnung der Korrosionsgeschwindigkeit in Anlehnung an den durch Impedanzspektroskopie bestimmten Polarisationswiderstände bei den Langzeitexperimenten.
- Erstellung eines Korrosionsmechanismus von GGG40 Stahl im Porenwasser vor und nach der Sättigung mit Wyoming-Bentonit.
- Systematische Korrosionsstudien von CuNi30Mn1Fe / 2.0882 in Porenwasser.
- Auswertung der Oberflächenanalyse ausgewählter Proben (SEM-EDX und XPS-Spektren).

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

A. G. Muñoz, D. Schild: Corrosion kinetics of spheroidal graphite cast iron GGG 40 in saturated bentonite, Vortrag auf Tage der Standortauswahl 2022 – Juni 2022, Aachen

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Hermann-von-Helmholtz-Platz 1, 76344 Eggenstein-Leopoldshafen		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11981B</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Implementierung eines Monitoringsystems zur Evaluierung der Korrosionsvorgänge an Behältermaterialien in Bentonit-basierten Endlagerkonzepten (IMKORB), Teilprojekt B		
<b>Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit</b> Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte, Feld: 2.4		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.08.2021 bis 31.07.2022	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2022 bis 30.06.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 86.423,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Finck	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

AP3: Laboruntersuchungen der Korrosion von Stahlcoupons in Bentonit

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

AP6: Dokumentation und Publikation

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

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

AP3: Ein Feinkornbaustahl und ein Federstahl wurden für alle Laborversuche in diesem AP ausgewählt. Für Korrosionsexperimente unter statischen Bedingungen wurden die Behälter vorbereitet, die Halterungen für die Coupons angefertigt und gespült, die Coupons geschliffen, poliert und deren Oberfläche eingehend charakterisiert. Der Bentonit wurde mit synthetischem Grundwasser unter Schutzgas äquilibriert. Jeder Behälter wurde mit 2 Coupons auf einer Halterung bestückt, anschließend wurde Bentonitsuspension hinzugegeben und das Gefäß zuletzt mit einem O-Ring dicht verschlossen. Korrosionsversuche wurden für eine Dauer von 3 Monaten in einer Ar-Box angesetzt (bei Raumtemperatur und bei 50 °C). Die Experimente bei Raumtemperatur wurden Ende Juni 2022 beendet.

Material, das für Experimente unter dynamischen Bedingungen benötigt wird, wurde bestellt.

AP4: In AP4 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. Ein Treffen mit allen MaCoTe Projektpartnern fand statt. Die Bereitstellung eines dritten Behälters für die Einlagerung einer zusätzlichen Serie von Coupons wurde diskutiert, mit wahrscheinlichem Beginn der Arbeiten in 2023. Ziel ist, hierdurch eine deutlich bessere Abbildung der zeitlichen Entwicklung des Korrosionsverhaltens der eingesetzten Coupons zu erhalten.

AP6: Keine Arbeiten innerhalb des Berichtszeitraums.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

AP3: Die Korrosionsexperimente bei 50 °C mit 3 Monaten Kontaktzeit unter statischen Bedingungen sollen beendet werden. Die Proben aus allen Versuchen bei Raumtemperatur und bei 50 °C unter statischen Bedingungen sollen detailliert untersucht werden, insbesondere hinsichtlich der Zusammensetzung des Porenwassers und der Charakteristika des Coupons und des Bentonit. Korrosionsexperimente mit einer Kontaktzeit von 12 Monaten sollen vorbereitet und begonnen werden.

Nach Erhalt aller bestellten Materialien werden Experimente unter dynamischen Bedingungen fertig aufgebaut, und eine abschließende Dichtigkeitsprüfung erfolgen.

AP4: Fortsetzung der wissenschaftlich/technischen Koordinierung hinsichtlich der Arbeiten von KIT-INE im Rahmen des MaCoTe Experiments im Untertagelabor Grimsel (CH).

AP6: Es sind im nächsten Halbjahr keine Arbeiten hierzu geplant.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Leibniz Universität Hannover, Welfengarten 1, 30167 Hannover		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11981C</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Implementierung eines Monitoringsystems zur Evaluierung der Korrosionsvorgänge an Behältermaterialien in Bentonit-basierten Endlagerkonzepten (IMKORB), Teilprojekt C		
<b>Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit</b> Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte, Feld: 2.4		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.08.2021 bis 31.07.2022	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2022 bis 30.06.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 108.358,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Hassel	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Hauptziel des Verbundvorhabens IMKORB mit der Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Fachbereich Endlagersicherheitsforschung, am Standort Braunschweig, der Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR) und dem Institut für Nukleare Entsorgung am Karlsruher Institut für Technologie (KIT-INE) ist das Design und die Implementierung eines Monitoringsystems zur Bewertung der Korrosionsverläufe von potentiellen Werkstoffen für Endlagerbehälter in Langzeit-In-situ-Experimenten durch Fernbestimmung von lokalen physikalisch-chemischen Parametern. Die Arbeiten werden strategisch in die Entwicklung einer sogenannten „Korrosionskarte“ und in die Entwicklung und Erprobung einer Messsonde unterteilt. Mittels der Korrosionskarte sollen Zusammenhänge zwischen der Art der Korrosion und den mittels Sensoren messbaren Indikatoren dargestellt werden. Hierzu ist ein möglichst umfassendes Verständnis der Korrosion von Metallen unter endlagernahen Randbedingungen in Ton- oder Kristallin Gestein erforderlich.

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

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im zweiten Halbjahr der Anschubfinanzierung wurden die Arbeiten zum Arbeitspunkt 2 fortgeführt. Nachdem im ersten Halbjahr durch eine Materialauswahl auf Basis einer ausgiebigen Literaturrecherche zu internationalen Konzepten zur Endlagerbehälterkonstruktion die Wahl auf verschiedene eisenbasierte und nicht-eisenbasierte Werkstoffe fiel, wurden die Werkstoffe beschafft, zu Coupons bearbeitet und zentral durch die GRS bereitgestellt. Die Probenmaterialien umfassen die Stähle 56Si7 (1.5026), 15MnNi6-3 (1.6210), Gusseisen GJS 400-15 (5.3106) und GJS 350 (5.3101), Edelstahl X12CrNi23-13 (1.4833), Zirkonium Zr702 (R 60702) und CuNi30Mn1Fe (2.0882). Um neben den hauptsächlich gewalzten Werkstoffen auch Proben aus Gussmaterial in das Portfolio einzubringen wurden Proben aus einem vorhandenen Großbehälter aus GJS 350 entnommen und in der Materialauswahl ergänzt. Zusätzlich wurden die bereits vorhandenen Coupons aus GJS 400-15 durch Proben aus gegossenen Blöcken erweitert, um an diesem Beispiel die Auswirkungen der Produktionstechnik zu betrachten und gegenüberstellen zu können.

Für die Untersuchungen des Grundmaterials wurden die Coupons geviertelt und von jedem drei Proben verwendet, um die Flächen senkrecht zur Quer-, Walz- und Normalrichtung für die Untersuchungen zu präparieren. Aus dem Blockmaterial aus GJS 400-15 wurden ebenfalls Proben in den entsprechenden Richtungen entnommen und präpariert. Da der Gussbehälter über drei verschiedene Materialquerschnitte entlang der Behälterhöhe verfügt, wurden aus jedem Bereich Proben entnommen, die mit einander vergleichbar sind. Die Entnahme erfolgte dicht unter der Innen- bzw. Außenmantelfläche sowie bei den dickeren Materialbereichen in mittlerer Position, auf vergleichbarere radialer Position wie die Proben des dünneren Querschnitts. Aufgrund der großen Anzahl an Proben wurden hier jedoch aus jeder Position nur zwei Proben entnommen und einmal die axial-radial-Ebene und einmal die axial-tangential-Ebene präpariert. Hierdurch sollen Informationen über die Gefügeausbildung und -homogenität bei unterschiedlichen Materialquerschnitten desselben Behälters gewonnen werden. Alle Proben wurden leitend warm eingebettet, geschliffen und poliert, um nachfolgende Untersuchungen mit dem Rasterelektronenmikroskop und EBSD zu ermöglichen. Für die lichtmikroskopischen Untersuchungen zur Beurteilung des ausgebildeten Gefüges wurden die Proben mit entsprechenden Ätzlösungen behandelt. In den Aufnahmen stellten sich bei einigen Proben eine für gewalzte Produkte typische zeilige Struktur heraus. Diese Zeiligkeit kann sich zusätzlich auch in einer Texturierung niederschlagen, was mittels XRD-Untersuchungen betrachtet wird. Auffällig war ebenfalls der Gusswerkstoff der Couponprobe. Der Werkstoff sollte bei einem üblichen Produktionsablauf ein ferritisches Gefüge aufweisen, in dem Graphitkugeln verteilt eingebettet sind. Nach der Ätzung zeigte sich hier jedoch ein perlitisches Gefüge, was auf eine rasche Abkühlung nach dem Gießen zurückzuführen ist. Die Proben aus dem Großbehälter und dem Blockmaterial zeigen beide ein ferritisches Gefüge. Diese Gefügeunterschiede sollten bei den weiteren Untersuchungen genauer betrachtet werden.

In den XRD-Untersuchungen zeigten sich bei zwei Werkstoffen eine eindeutige Texturierung. Die betraf das Zirkonium in besonderem Maße, da sich hier die Textur in mehreren Ebenen ausgebildet hat, was auf eine annähernd identische Kornorientierung im Material schließen lässt. Der zweite Fall liegt beim Federstahl 56Si7 vor. Dieser weist jedoch nur in eine Richtung eine eindeutige Textur auf, was darauf schließen lässt, dass zwar eine Ebene der Körner häufig gleich ausgerichtet ist, diese jedoch zueinander verdreht sein kann.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Im weiteren Verlauf sollen die Untersuchungen entsprechend des Aufstockungsantrages fortgeführt werden. Dies umfasst u. a. weitere Grunduntersuchungen und experimentbegleitende Analysen.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Technische Universität Clausthal, Adolph-Römer-Str. 2a, 38678 Clausthal-Zellerfeld		<b>Förderkennzeichen:</b>  <b>02 E 11991</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Entwicklung und Validation einer neuartigen Versuchstechnik für triaxiale Kriechversuche bei geringer deviatorischer Belastung (KRIECHTECH)		
<b>Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit</b> Bereich C1: Standortauswahl, Feld: 1.2		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2021 bis 30.09.2024	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2022 bis 30.06.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 304.468,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Düsterloh	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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



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

AP1: Vorbereitung Laborraum (Dämmung Laborraum, Einbau Isolierglasfenster und Türen, elektrische Versorgungsleitungen, Aufbau Hebekran für Ein- und Ausbau der Triaxialzellen), Bestellung Material und Prüfanlagenkomponenten, mechanisch-hydraulischer Aufbau von drei Triaxialprüfständen (Fertigstellung 3 Triaxialzellen mit Lastrahmenkonstruktion, Installation 3 Stück EMC-Zylinder für Axiallaststeuerung)

AP2: -

AP3: -

AP4: -

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

AP1: Fertigstellung Triaxialprüfstände und Inbetriebnahme

AP2: Herstellung Steinsalzprüfkörper für Kalibrierungsversuche

AP3: -

AP4: -

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

Keine.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Kaiserstr. 12, 76131 Karlsruhe		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 12001A</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Sandwich Support Projekt 1: Heterogene Bentonithydratation (SANDWICH-SP1), Teilprojekt A		
<b>Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit</b> Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte, Feld: 2.3		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.12.2021 bis 30.11.2024	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2022 bis 30.06.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 323.058,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Emmerich	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Ziel des Vorhabens ist die Vorhersage des makroskopischen Quelldrucks und die hydro-mechanisch-chemische Modellierung von 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 (-HP) verbessert wird. Das Projekt ist ein Verbundprojekt zwischen KIT und RUB. Die Projektleitung liegt bei KIT.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

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

- AP1: Die Zusammenstellung bekannter Materialparameter der zu untersuchenden Bentonite aus Literatur und Ergebnissen aus dem Sandwich-HP wurde fortgesetzt und Material für die durchzuführenden Quelldruckuntersuchungen beschafft. Das Protokoll zur Herstellung der homoionischen Teilproben wurde erarbeitet (AP1.1).  
Die Konstruktion der  $\mu$ CT geeigneten Quelldruckzellen wurde begonnen.
- AP2: Siehe Bericht RUB zu Teilprojekt B (02 E 12001B)
- AP3: Es wurden noch keine Arbeiten zu AP3 durchgeführt.
- AP4: Es wurde ein Projektmeeting zur Abstimmung der relevanten Material- und Prozessparameter für die Quelldruckmessungen sowie zur Konstruktion der  $\mu$ CT geeigneten Quelldruckzellen durchgeführt.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

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

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

Siehe Bericht RUB zu Teilprojekt B (02 E 12001B)

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Ruhr-Universität Bochum, Universitätsstr. 150, 44801 Bochum		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 12001B</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Sandwich Support Projekt 1: Heterogene Bentonithydratation (SANDWICH-SP1), Teilprojekt B		
<b>Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit</b> Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte, Feld: 2.3		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.12.2021 bis 30.11.2024	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2022 bis 30.06.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 268.932,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Baille	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

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

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

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

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

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

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

AP2: Finalisierung Zusammenstellung bekannter Hydratationsversuche und deren geotechnischer Initialzustände der zu untersuchenden Bentonite aus Literatur und Ergebnissen des Sandwich-HP.

Fortführung der Elementversuche bei verschiedenen Randbedingungen (homogen und heterogen). Beginn des ersten Säulenversuches.

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

Poster Clay Conference Nancy Juni 2022 zu o. g. Vorarbeiten des AP3



## **2.2 Vorhaben Bereich D1 – D3**

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Technische Universität Clausthal, Adolph-Roemer-Str. 2a, 38678 Clausthal-Zellerfeld		<b>Förderkennzeichen:</b>  <b>02 E 11849A</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt A		
<b>Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit</b> Bereich D2: Sozio-technische Fragestellungen, Feld:2.1		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2019 bis 30.09.2024	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2022 bis 30.06.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 3.003.244,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Röhlig	

### 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

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

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

Modul SAFE 3: Transdisziplinäre Kommunikation und Auswertung

Modul SAFE 4: Ergebnisdarstellung von Modellrechnungen, Indikatoren, Ungewissheiten

Modul SAFE 5: Analyse des langzeitigen Systemverhaltens von Tiefenlagern

Modul SAFE 7: Lösungsorientierte Berichterstattung und Empfehlungen

Modul TRUST 4: Analyse des Tiefen-/Endlagerverhaltens im Monitoringzeitraum anhand von numerischen TH<sup>2</sup>M-gekoppelten Simulationen: Literaturanalyse; Interaktiver Aufbau einer Gesprächsbasis mit der AGBe; Exemplarische Analyse des offenen/versetzten Tiefen-/Endlagerverhaltens im Monitoringzeitraum anhand von numerischen TH<sup>2</sup>M-gekoppelten Simulationen; Diskursiver Dialog mit der AGBe zur Identifizierung von Anforderungen an die Ausgestaltung von als vertrauenswürdig angesehenen Monitoringprogrammen; Rückspiegelung an außerwissenschaftliche Akteure/AGBe; Aufbau einer Plattform zur Visualisierung und Illustration von Simulationsergebnissen.

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Die Arbeiten im Gesamtvorhaben sowie in den TAP wurden fortgesetzt. Durch geeignete Maßnahmen wurden die Auswirkungen der Covid-19-Pandemie auf das Projekt minimiert. An der TU Clausthal wurde der LfdG zu einer Abteilung des IELF. Die Akronyme wurden daher von IELF zu ELS (Endlagersysteme) und von LfdG zu GemS (Geomechanik und multiphysikalische Systeme) geändert.

ELS (Koordination und Kommunikation): Am 13. und 14.1. wurde ein Klausurtreffen der Teamleitungen durchgeführt, welches pandemiebedingt digital stattfinden musste. Die Kerngruppe Evaluation traf sich am 7.3. in Frankfurt/Main und



wurde seitdem kontinuierlich betreut. Struktur und Erstellungsprozess für den Evaluationsbericht wurden entwickelt. Beides wurde beim folgenden Projekttreffen verabschiedet. In Zusammenarbeit mit der ETH Zürich wurde vom 16. bis 18.3. dieses TRANSENS-Projekttreffen in Zürich organisiert und durchgeführt. Treffen mit dem Beirat fanden am 2.3. (TD-Forschung, TAP DIPRO), am 27.4. (TAP HAFF) und am 25.5. (TAP TRUST) statt. Der TRANSENS-Bericht Nr. 6 wurde redaktionell und organisatorisch zur Open-Access-Veröffentlichung gebracht. Aufgaben wie die Zusammenstellung des Berichts des Koordinators, die Weiterentwicklung von Newsletter, Webseite und der Online-Datenbank zu Veröffentlichungen wurden kontinuierlich bearbeitet.

ELS (TAP SAFE, EDU): Zur verstärkten Bearbeitung des TAP SAFE Moduls 4 wurde zum 1.4. neues Personal eingestellt. Im Zuge der empirischen TD-Forschung im Modul 3 wurde der AGBe-Intensivworkshop (12.12.2021) ausgewertet. Darauf aufbauend wurde am 7.5. der dritte AGBe-Workshop mit dem Fokus ‚Szenarientwicklung‘ durchgeführt. Fachliche Zusammenarbeit wurde durch die GRS geleistet. Der Workshop lieferte wichtige Ergebnisse, insbesondere zum elektronischen Safety Case. Mitglieder der AGBe nahmen am 3rd IGSC-FSC Joint Workshop on “Building Confidence in the Face of Uncertainty: The Role of the Safety Case” der OECD/NEA vom 17.-19.5. teil. Am 1.6. wurde ein TAP-SAFE-Treffen in Clausthal durchgeführt. Ein zentrales Thema waren Indikatoren (in Hinblick auf die Module 4, 5 und 6). Der Bericht zur Selbstevaluation wurde erstellt. Es wurden zwei Beiträge zur Ringvorlesung geleistet sowie an der Planung und Gewinnung von Vortragenden der Sommerschule mitgewirkt.

GemS: Mit dem Simulator FTK 4.0 wurden auf Lokalmittel-Ebene im Steinsalz Simulationszeiträume von >10.000 Jahren erreicht. Eine erste Version des Stoffmodells Lux/Wolters/Lerche-T mit transversaler Elastizitätsmatrix wurde entwickelt und getestet. Des Weiteren wurde an der Ergebnisdokumentation gearbeitet. Es wurden zwei Vorlesungen im Rahmen der TRANSENS-Ringvorlesung gehalten sowie an einer Vorlesung der TU Braunschweig zur „Entsorgung radioaktiver Abfälle und Nachhaltigkeit“ mitgewirkt. Die räumlichen Konsequenzen einer Überfahrungssohle wurden ermittelt und diskutiert. In Kooperation mit UK-A&O wurde ein weiteres Experiment zum „menschlichen Faktor in numerischen Simulationen“ durchgeführt. Die Modellergebnisse und deren Visualisierung zum menschlichen Faktor sowie die THM-Simulationsergebnisse stehen als Input für TD-Formate in Modul 3 entsprechend Meilenstein 17 und 18 zur Verfügung. In TAP TRUST wurde als weiterer Schritt auf Meilenstein 16 hin ein zweiter AGBe-Workshop zum Thema Monitoring durchgeführt.

risicare: risicare ist in der Person von Anne Eckhardt als Co-Sprecherin von TRANSENS in die Organisation des Gesamtprojektes eingebunden. Arbeitsschwerpunkte von risicare zum TAP SAFE im ersten Halbjahr 2022 waren:

Mitwirkung am TD-Experiment mit der AGBe; Koordination und Mitwirkung am Projekt eines interdisziplinären Sammelbands zum Thema Ungewissheiten, d. h. Leitung des Herausgeberteams, Durchführung zweier online-Workshops und ein eigener Beitrag zum Sammelband; sowie Mitwirkung bei der Selbstevaluation. Daneben hat risicare im Herausgeberteam einer Ausgabe der Zeitschrift TATuP «The future of final disposal. Developments and challenges after the site selection» mitgewirkt und an einem Beitrag zur Governance der Entsorgung radioaktiver Abfälle in der Schweiz im Buchprojekt «Future of radioactive waste governance» des Rathenau Instituts.

#### 4. Geplante Weiterarbeiten

ELS (Koordination und Kommunikation): Die geplanten Veranstaltungen (Arbeitstreffen Herbst 2022, Projekttreffen Darmstadt 2023) werden organisiert und die Durchführung begleitet. Die Jour Fixes mit dem Beirat TD werden fortgeführt und die Selbstevaluation von TRANSENS wird abgeschlossen.

ELS (TAP SAFE, EDU): Im TAP SAFE wird die Arbeit im Modul 4 intensiviert. Der Schwerpunkt „Indikatoren“ wird in TD-Formaten bearbeitet werden. Darüber hinaus wird die AGBe-Arbeit dokumentiert. Beiträge zur Sommerschule, zum OECD/NEA-Workshop zum elektronischen safety case und zur DAEF-Konferenz sind geplant.

GemS: Das Stoffmodell Lux/Wolters/Lerche-T mit transversaler Elastizitätsmatrix soll weiterentwickelt, verifiziert und validiert werden. Im Folgenden sollen THM-Simulationen am reduzierten Lokalmittelmodell sowie am 1- und 2-Sohlen-Lokalmittelmodell im Tonstein durchgeführt werden. Die Auswertung des zweiten AGBe-Workshops soll erfolgen und die Zusammenarbeit mit Prof. Sträter weitergeführt werden. Gemeinsam mit ELS soll an der Optimierung der Visualisierung von Zustandsgrößen gearbeitet werden.

risicare: Die Arbeitsschwerpunkte des ersten Halbjahres werden weitergeführt. Die Arbeiten zum Sammelband Ungewissheiten werden bis Ende 2022 weitgehend abgeschlossen sein. Zu einzelnen Ergebnissen aus dem TD-Experiment sollen – in Absprache mit anderen Teams bei SAFE – vertiefende Arbeiten durchgeführt werden.

#### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Eckhardt, A. und Röhlig, K.-J. (2022): Safety facing uncertainty - decisions about and under uncertainty. Extraordinary Meeting Of The Integration Group For The Safety Case (IGSC), Bern

Othmer, J. A et al (2022): Transdisziplinäre, interdisziplinäre und disziplinäre Forschung zur Thematik des Endlagermonitorings. Tage der Standortsuche 2022, RWTH Aachen. Aachen. Online verfügbar unter <https://standorttage2022.de/wp-content/uploads/2022/06/Tagungsband-Tage-der-Standortauswahl-2022.pdf>

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Christian-Albrechts-Universität zu Kiel, Christian-Albrecht-Platz 4, 24118 Kiel		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11849B</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt B		
<b>Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit</b> Bereich D2: Sozio-technische Fragestellungen, Feld:2.1		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2019 bis 30.09.2024	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2022 bis 30.06.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 1.375.945,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Ott	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

In TRANSENS soll transdisziplinär geforscht werden: Die interessierte Öffentlichkeit und andere außerakademische Akteure werden planvoll in Forschungskontexte, konkret in Transdisziplinäre Arbeitspakete (TAP) eingebunden.

Die Möglichkeiten transdisziplinärer Forschung in der nuklearen Entsorgung werden im Verbund systematisch reflektiert (Transdisziplinaritätsforschung). Spezielle Aktivitäten zielen auf Nachwuchsförderung und Kompetenzerhalt.

Die Antragstellenden der CAU sind Projektpartner im TAP DIPRO.

Dialog und Diskurs sind Schlüssel zur Verständigung. Wie muss der langwierige Prozess gestaltet werden, um dafür gute Bedingungen auf dem Entsorgungspfad zu schaffen? Das ist Gegenstand der transdisziplinären Forschung im TAP DIPRO.

Am Philosophischen Seminar und am Institut für Informatik werden in interdisziplinärer Kooperation (i) Narrative des Entsorgungsdiskurses analysiert, (ii) eine Theorie von "wicked communication" entwickelt, (iii) gesellschaftliche Steuerungsmedien bewertet, (iv) Nachvollziehbarkeit und Transparenz des Entsorgungsprozesses wissenschaftstheoretisch untersucht und über Visualisierungen für den transdisziplinären Forschungsmodus aufbereitet, unterstützend wird hierzu (v) eine Multimediawerkstatt aufgebaut.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Das Arbeitsprogramm in DIPRO zeichnet sich durch eine disziplinäre Aufbereitung von Sachverhalten, die interdisziplinäre Verständigung darüber und im Kern der Forschungsarbeit durch Workshops aus, bei denen verschiedene transdisziplinäre Formate entsprechend der Themensetzung zur Anwendung kommen werden. Im ersten Projektjahr soll zudem eine eigens für DIPRO gebildete Begleitgruppe aus wenigen Laien eingesetzt werden, die die Gestaltung und die Inhalte der Workshops über die Projektlaufzeit hin reflektiert. Die zentralen Forschungsfragen, die DIPRO an die Begleitgruppe und die Workshops stellt, sind:

1. Welche normativen Voraussetzungen, praktischen Anforderungen und gesellschaftlichen Erwartungen gilt es, für ein gerechtes und resilientes Verfahren und den jeweiligen Entsorgungspfad zu berücksichtigen?
2. Welche gesellschaftlichen Erwartungen und Ansprüche an eine zielführende Endlager-Governance und Öffentlichkeitsbeteiligung lassen sich identifizieren und wie können diese in politische Maßnahmen einfließen?
3. Wie ist das Standortauswahlverfahren unter Bedingungen von „wicked problems“ und „wicked communication“ im Sinne von „good governance“ auszugestalten?

Neben anwendungsorientierter Grundlagenforschung (desk-research, Experimente) bestehen die wesentlichen Arbeitspunkte des Kieler Teilprojektes in der Entwicklung, Durchführung und Evaluation transdisziplinärer Formate (Workshops, Multimediawerkstatt, Informationsdesigns). Inhaltliche Schwerpunkte liegen auf Verfahrensgerechtigkeit, Kommunikation und Standortverantwortung.

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- Weiterentwicklung Kommunikationsstrukturen innerhalb DIPROs
- Fortsetzung Aufarbeitung des Forschungsstandes inter- und transdisziplinärer Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle
- Auswertung des Workshops C und Diskussion der ersten Ergebnisse mit anderen DIPRO-Teams sowie mit TAP-HAFF (06.04.2022 online)
- Erster Entwurf eines DIPRO-Arbeitsberichts zu Ergebnissen des Workshops C
- Mitverfassung und Durchführung der Präsentation von TD-Arbeiten in DIPRO am Jour Fix des TRANSENS-TD-Beirats (02.03.2022 online)
- Mitverfassung der Präsentation „Evaluation: TD-Beispiel I aus DIPRO“ für das Projekttreffen in Zürich (16.03.2022)
- Mitorganisation des Workshops D am ITAS in Karlsruhe (07.-08.05.2022)
- Kontinuierliche Arbeit mit der DIPRO-Begleitgruppe (DBG): monatliche Teeküche; Inhaltliche Workshops zur a) Beschließung des Arbeits- und Forschungsplans (23.01.2022 online), b) Reflexion des Workshops C in Kiel (12.03.2022 online) sowie c) Reflexion der Ergebnisse der DBG-Selbstevaluierung (20.06.2022 online). Zudem Feedback zu transdisziplinären Formaten für den Workshop D (April); Teilnahme der DBG an den TRANSENS-Treffen im März an der ETH Zürich
- Kontinuierliche Vorbereitung des TRANSENS-Arbeitstreffens in Kiel
- Kontinuierliche Vorbereitung des Workshops E-1 (mit TAP HAFF; zweiwöchentlich)
- Mitverfassung der DIPRO-Zwischenevaluierung
- Einreichung von 3 wissenschaftlichen Beiträgen zum TATuP thematischen Heft 03/2022
- Einreichung zu WebGIS-Studie auf GISalzburg22 Konferenz
- Verfassung von 2 Beitragsskizzen für den TAP-übergreifenden Sammelband zum Thema Ungewissheiten (siehe auch geplante Weiterarbeiten). Teilnahme am 2. Workshop des Sammelbands (31.01.2022)
- Nachbesprechung der WebGIS-Studie der Multimedia-Werkstatt mit DBG (25.02.2022) und Vorstellung und transdisziplinäre Reflexion der Ergebnisse mit Teilnehmenden der Studie (08.04.2022 und 12.04.2022 online)
- Durchführung eines studentischen Projekts zum Thema „sprachbasiert KI für Beteiligung?“ und Einreichung von Beitrag zum Thema auf Mensch und Computer 22 Konferenz
- Schulungen in Ten-Steps-TD-Methode; Teilnahme an regelmäßige TD-Treffen mit anderen TAPs
- Vorstellung von Projektergebnissen: Sierra, Rosa: Ungewissheiten und Hoffnung beim Umgang mit dem soziotechnischen Problem der hochradioaktiven Abfälle. Forschungskolloquium Lehrstuhl für Mittelalterliche und Praktische Philosophie, 27.06.2022
- Vortrag in TRANSENS-Ringvorlesung zu Informationsdesign in der td-Arbeit

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Besuch des Infozentrums am AKW Brokdorf zum Zweck der weiteren Planung des Workshops E-1 (13.07.2022)
- Durchführung des TRANSENS-Arbeitstreffens in Kiel (28.-30.09.2022)
- Durchführung von Workshop E-1 (14.-15.10.2022); Vorbereitung Workshop E-2
- Einreichung von 2 Beiträgen für den Sammelband Ungewissheiten. Teilnahme am Autoren-Workshop des Sammelbands
- Veröffentlichung der Ergebnisse der WebGIS-Studie (2022)

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Sierra, Rosa (2022): Das Steckbrief-Rollenspiel im Kontext anderer Tools und Formate der transdisziplinären Zusammenarbeit. (Beitrag zum DIPRO-Arbeitsbericht 02; eingereicht im März 2022)

Sierra, Rosa und Ott, Konrad (2022): Participation after the site selection. The role and form of citizen participation in late stages of the disposal process. TATuP 03/2022 (eingereicht am 10.06.2022)

Schwarz, L., & Bräuer, P. (2022). An Exploratory PPGIS for the Nuclear Waste Repository Siting Procedure in Germany – a Transdisciplinary Approach to Enable Meaningful Participation? *GI\_Forum 2022*, Volume 10, 77–90. [https://doi.org/10.1553/giscience2022\\_01\\_s77](https://doi.org/10.1553/giscience2022_01_s77)

Ott, Konrad (2022): Ethical Aspects of High Level Nuclear Waste Management. In: Klaus Röhlig (Ed.): *Nuclear Waste. Management, Disposal and Governance*. IOP Publishing

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Freie Universität Berlin, Kaiserswerther Str. 16-18, 14195 Berlin	<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11849C</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt C	
<b>Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit</b> Bereich D2: Sozio-technische Fragestellungen, Feld:2.3	
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2019 bis 30.09.2024	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2022 bis 30.06.2022
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 991.894,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Brunnengräber

### 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

In TRANSENS wird transdisziplinär geforscht: Die interessierte Öffentlichkeit und andere außerakademische Akteure werden planvoll in Forschungskontexte, konkret in Transdisziplinäre Arbeitspakete (TAP), eingebunden. Die Analyse der transdisziplinären Forschungsaktivitäten soll Hinweise liefern, wie die Kommunikation zwischen Wissenschaft und den Beteiligten des Standortauswahlverfahrens und der Bevölkerung verbessert werden kann. 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:

- Narrative und Frames der Entsorgungsdiskurse/wicked communication,
- Charakteristika von wicked problems aus dialogischer Perspektive,
- Wissensbestände und vertrauensbildende Wissensaufbereitung und –vermittlung sowie
- Formen und Medien der Regulierung.

Die FU Berlin ist zudem in die Transdisziplinäre Begleitung eingebunden (TD-Begleitung). Hier erfolgt die formative und reflektierende Begleitung der TAP-Forschenden und der am Forschungsprozess beteiligten Öffentlichkeit wie der außerakademischen Akteure.

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- 6 Vorträge bei Fachtagungen und Workshops
- 3 Einreichungen von Beiträgen in Journal
- Veröffentlichung eines Policy Papers, eines Zeitungsbeitrags und eines Artikels (peer-review)

DIPRO:

- Begleitforschung zum „Forum Endlagersuche“ in Mainz (20./21. Mai), zu AGs und Vorbereitung
- Zusammenarbeit mit der DIPRO-Begleitgruppe: Konsultation der DBG zum Konzept Workshop B; Durchführung mehrerer Treffen; Reflektion der Selbstevaluation der DBG
- Arbeit mit DIPRO-Begleitgruppe und externen Prozessakteuren zum WebGIS als Dialogmittel (Koop. mit CAU Kiel), zwei abschließende Ergebnisworkshops

- Fortführung der Konzeption und Organisation von Workshop B und 2 weiteren Workshops (I. Zur Öffentlichkeitsbeteiligung, II. Zum Science-Policy Interface)
  - Arbeit an peer-reviewed Veröffentlichungen: 1. Konzeptpapier zum „weichen Endlagerstaat“, 2. Kompensation, 3. FJSB-Beitrag zum „Forum Endlagersuche“, 4. TD in der Endlagerforschung, 5. Zwei TATuP-Beiträge zu den Promotionsvorhaben (eingereicht), 6. Beitrag zu einer neuen Perspektive auf Gerechtigkeit (in Vorbereitung), 7. Papier zu wicked financing (im Entwurf)
  - Teilnahme am DIPRO-Workshop D in Karlsruhe
- BegleitTeam.TD:
- TelKos zur Vorbereitung und Unterstützung bei online Treffen mit TD-Beauftragten
  - Organisation und Durchführung eines Mini-Workshops zum Thema „Peer-Beratung“ beim Projekttreffen Zürich (in Kooperation mit ETH Zürich)
  - Organisation eines Workshops zu „Neue TD-Methoden kennenlernen“ für Projekttreffen in Kiel
  - Austausch und Erarbeitung eines Beitrages zum Thema „Mehrwert“ transdisziplinärer Forschung

#### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Fertigstellung eines Manuskripts zum „Forum Endlagersuche“ und Veröffentlichung
- Weiterarbeit am Paper, das bei der ECPR vorgestellt wurde/Einreichung (peer-reviewed)
- Fertigstellung des Manuskripts zu „Transdisziplinarität“
- Fertigstellung des Konzeptpapiers „Gute Öffentlichkeitsbeteiligung“
- Organisation und Durchführung des Workshop B sowie der Workshops I/II

#### 5. Berichte, Veröffentlichungen

##### VORTRÄGE:

Themann, D.: Überlegungen zur Evaluation künftiger Öffentlichkeitsbeteiligung in der Standortsuche. Workshop Evaluation I - Beteiligung lernen, organisiert vom Planungsteam Forum Endlagersuche, 22.04.2022, online; Governance von Gemein(un)gütern - Praktiken des Commoning in der Endlager-Governance? Projekttreffen Zürich, 17.03.2022, online

Brunnengräber, A.: Soziotechnische Analogie als Erfahrungshintergrund für die Endlagerung hochradioaktiver Abfälle. TU Berlin, 27.01.22, online; Kritische Anmerkungen zur Kompensation DIPRO-Workshop am KIT, 07.05.2022

Schwarz, Lucas: Political Ecology and Nuclearity. Augsburger Forschungswerkstatt, 07. Mai 2022; Gerechtigkeit als Netzwerk – Eine neue Perspektive auf den Umgang mit hochradioaktiven Abfällen. Projekttreffen Zürich, 17.03.2022, online

##### VERÖFFENTLICHUNGEN:

Schwarz, L.; Bräuer, P. (2022): An Exploratory PPGIS for the Nuclear Waste Repository Siting Procedure in Germany – a Transdisciplinary Approach to Enable Meaningful Participation? In: GI\_Forum, 10 (1), 77-90. DOI: 10.1553/giscience2022\_01\_s77

Sieveking, J.; Schwarz, L.; Themann, D.; Brunnengräber, A. (2022): Auf dem Weg zum weichen Endlagerstaat, Hannover: Stiftung Leben & Umwelt / Heinrich-Böll-Stiftung Niedersachsen

Brunnengräber, A. (2022): Wenn das Atomkraftwerk zur Waffe wird, Berliner Zeitung 24.03.2022

Themann, D. (2022): Dissense sind wichtig, um überhaupt hinterfragen und reflektieren zu können - Interview mit Mareike Andert für Stiftung Leben und Umwelt / Heinrich-Böll-Stiftung Niedersachsen

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Hermann-von-Helmholtz-Platz 1, 76344 Eggenstein-Leopoldshafen		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11849D</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt D		
<b>Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit</b> Bereich D2: Sozio-technische Fragestellungen, Feld:2.1		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2019 bis 30.09.2024	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2022 bis 30.06.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 550.967,50 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Metz	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

In TRANSENS soll transdisziplinär zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland geforscht werden. Die interessierte Öffentlichkeit und andere außerakademische Akteure werden planvoll in Forschungskontexte, konkret in Transdisziplinäre Arbeitspakete (TAP) eingebunden. Die Möglichkeiten transdisziplinärer Forschung in der nuklearen Entsorgung werden im Verbund systematisch reflektiert (Transdisziplinaritätsforschung). Spezielle Aktivitäten zielen auf Nachwuchsförderung und Kompetenzerhalt.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Die Schwerpunkte der Arbeiten des KIT-INE liegen im Modul „Pfadabhängigkeit als Risiko und Herausforderung“ des TAP „Handlungsfähigkeit und Flexibilität in einem reversiblen Verfahren“ (HAFF).

Unsere Arbeiten gliedern sich in das

AP1: „Sicherung von Handlungsfähigkeit im Standortauswahlverfahren und der Betriebsphase“ und das

AP2: „Technische und verfahrenstechnische Komponenten von Entsorgungspfaden und deren Nebenfolgen“.

In diesem Modul werden von uns Fragestellungen überprüft, die im Kontext des Standortauswahlverfahrens für Wärme entwickelnde Abfälle hinsichtlich Reflexivität und Reversibilität des Verfahrens von besonderer Bedeutung sind. Hierzu werden Arbeiten zur Zwischenlagerung und Entwicklung von Tiefenlagersystemen unter Berücksichtigung der technischen Barrieren und deren Implikationen durchgeführt, wobei insbesondere die Verknüpfung von Infrastruktur-, Strahlenschutz- und Betriebssicherheitsaspekten verschiedener Komponenten des Entsorgungspfads analysiert werden. Im weiteren Verlauf des Verbundvorhabens soll gemeinsam mit Partnern des TAP HAFF Haltepunkte definiert werden, an denen der jeweilige Sicherheitsstatus eines Entsorgungspfads überprüft und ein Dialog mit der Bevölkerung angestrebt wird.

Zusammenarbeit im Forschungsverbund TRANSENS: Das Arbeitspaket 2 „Technische und verfahrenstechnische Komponenten von Entsorgungspfaden und deren Nebenfolgen“ wird durch einen Mitarbeiter des KIT-INE geleitet.

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im ersten Halbjahr 2022 wurden weiterführend nun unter Leitung von Dirk Scheer (KIT-ITAS) Aktivitäten zu Pfadidentifikation und Folgenanalyse durchgeführt und beinhalten Arbeiten zur vergleichenden Pfadheuristik „Zukunftspfade Endlager“. Das Konzept der Pfadheuristik strukturiert den Ansatz nach drei Ebenen, die sich aus der konsistenten Beschreibung der „Zukunftspfad(e)“ über Ziele, Wege, Mittel (Identifikation), den dazu nötigen Schritte und Maßnahmen, um den gewünschten Pfad zu erreichen (Umsetzung) und der Betrachtung der Wirkungen und Nebenwirkungen die jeweiligen Maßnahmen (Folgenanalyse) zusammensetzen. Dazu wurden Kurzbeschreibungen der Pfade als Ausgangspunkte erstellt. Einige Treffen zur gemeinsame Abstimmung für weiteres Vorgehen fanden statt. Als nächster Schritt steht die Bearbeitung der Langbeschreibung der Pfade an.

TAP-übergreifende Aktivitäten ergeben sich durch die Beteiligung am TRANSENS - Sammelband «Ungewissheiten». Frank Becker wird sich dort mit zwei Themen beteiligen, zu denen bereits Exposés erstellt wurden und danach in den zwei Beitragsskizzen „Kommunikation von quantitativen Ergebnissen“ und „Ungewissheiten und Narrative – eine schwierige Beziehung?“ weiter ausgeführt wurden. Die Beitragsskizzen dienen als Grundlage zur Abstimmung der verschiedenen Beiträge zum interdisziplinärer TRANSENS-Bericht zu Ungewissheiten. Dabei ist Frank Becker mit im Herausgeberteam und mittlerweile wurden in diesem Team ein Konzept für den Sammelband entwickelt und Leitplanken für die Beiträge erarbeitet.

Eine weitere TAP-übergreifende Aktivität ist die Zusammenarbeit von KIT-INE mit der Technische Universität Berlin/Wirtschafts- und Infrastrukturpolitik (TUB-WIP) zum Thema „techno-ökonomischen Aspekte“ in TRANSENS. Prof. Christian von Hirschhausen und seine Arbeitsgruppe der TUB-WIP führten gemeinsam mit Frank Becker, Volker Metz und weiteren KIT-INE Kollegen ein virtuelles Seminar am 25. Februar 2022 durch.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Mit weiteren Mitarbeiterinnen und Mitarbeitern des TAP-HAFF werden die Pfadidentifikation und Folgenanalysen weiterentwickelt. Für die Bearbeitung der Langbeschreibung der Pfade sind mehrere Treffen geplant, um eine Verständigung über die gemeinsame Vorgehensweise der Langbeschreibung der Pfade zu erzielen. Darauf aufbauend soll auch eine grafische Darstellung zur Illustration potentieller, verzweigter und miteinander verknüpfter Entsorgungspfade entwickelt werden.

Die Beiträge zum interdisziplinärer TRANSENS-Bericht zu Ungewissheiten sollen im zweiten Halbjahr 2022 fertig gestellt werden und schließlich eine geeignete Publikationszeitschrift gefunden werden.

Die Auswahl, Einstellung und Einarbeitung einer geeigneten Kandidatin oder eines geeigneten Kandidaten für die Promotionsstelle wurde aufgrund der Einschränkungen durch COVID-19 bedingt auf das zweite Halbjahr 2022 verschoben.

Neben einigen virtuellen Treffen im Arbeitspaket TAP HAFF ist eine Teilnahme am TRANSENS Arbeitstreffen vom 28. bis 30. September 2022 an der Christian-Albrechts-Universität zu Kiel geplant.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Hermann-von-Helmholtz-Platz 1, 76344 Eggenstein-Leopoldshafen		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11849E</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt E		
<b>Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit</b> Bereich D2: Sozio-technische Fragestellungen, Feld:2.1		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2019 bis 30.09.2024	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2022 bis 30.06.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 2.720.831,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Hocke-Bergler	

### 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

In TRANSENS soll transdisziplinär zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland geforscht werden. Die interessierte Öffentlichkeit und andere außerakademische Akteure werden planvoll in Forschungskontexte, konkret in Transdisziplinäre Arbeitspakete (TAP) eingebunden. Die Möglichkeiten transdisziplinärer Forschung in der nuklearen Entsorgung werden im Verbund systematisch reflektiert (Transdisziplinaritätsforschung). Spezielle Aktivitäten zielen auf Nachwuchsförderung und Kompetenzerhalt.

### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Die ITAS-Schwerpunkte liegen im TAP HAFF und im TAP DIPRO. Wir leisten Grundlagenforschung zu Fragen der Reversibilität und des gesellschaftlichen Dialogs, die im deutschen Standortauswahlverfahren eine besondere Rolle spielen.

TAP HAFF: „Handlungsfähigkeit und Flexibilität in einem reversiblen Verfahren“ mit den Themen Pfadabhängigkeit als Risiko und Herausforderung, Raumwirkungen vor dem Hintergrund von Endlager-Governance sowie technische und verfahrenstechnische Komponenten von Entsorgungspfaden und deren Nebenfolgen.

TAP DIPRO: „Dialoge und Prozessgestaltung in Wechselwirkung von Recht, Gerechtigkeit und Governance“, mit dem Thema Gerechtigkeit als Ausgangspunkt. Gerechtigkeitsfragen haben insbesondere bei Projekten wie der Standortsuche und der Realisierung eines Endlagers einen hohen gesellschaftlichen Stellenwert.

Zusammenarbeit im Forschungsverbund:

Mit dem TAP SAFE wird empirisch kooperiert. Ebenso kooperiert ITAS im Rahmen der Transdisziplinaritätsforschung mit den TD-Experten innerhalb des Forschungsverbundes (I-TD und BegleitTeam.TD). ITAS ist im Sprecherteam des Forschungsverbundes ebenso vertreten wie in der I-TD (2 Mitarbeiter). TAP HAFF und TAP DIPRO werden jeweils durch einen ITAS-Mitarbeiter geleitet.

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

TAP HAFF: Die geplante Datenerhebung für das ITAS-AP „Verwaltungshandeln in einem bundesdeutschen reversiblen Verfahren für die aktuelle Suche nach einem Endlagerstandort für hochradioaktive Abfälle“ wurde zum überwiegenden Teil abgeschlossen und mit der Aufbereitung der Daten wurde begonnen. Die konzeptionellen Grundlagen zum zweiten ITAS-Themenstrang „Denken in Alternativen“ wurden durch Desk Research auf die Dimension „Pfadabhängigkeit als Risiko und Herausforderung“ zugespitzt und Zwischenergebnisse erfolgreich als Vortragsthema bei einer Konferenz eingereicht (Vortrag „Images for the Future“). Von der empirischen Seite arbeitet hier das interdisziplinäre ITAS-Teilprojekt „Zukunftspfade Endlager – Entwicklung und Analyse einer Pfadheuristik unter den Paradigmen Handlungsfähigkeit und Flexibilität in einem reversiblen Verfahren“ zu, wie es in HAFF untersucht wird. Vom ITAS-Team wurden zusammen mit den HAFF-Kooperationspartnern als Zukunftspfad plausibel begründbare Optionen ausgewählt; die interdisziplinär erstellten „dichten Beschreibungen“ befinden sich in Überarbeitung. Im Rahmen der HAFF-Leitung wurden inhaltliche Arbeitsteilungen zusammengefasst und erste HAFF-Zwischenergebnisse festgehalten. Wichtig sind dabei die vertieften HAFF-Kooperationen mit dem KIT-INE, dem TUB-iBMB, dem LUH-IW und dem Öko-Institut sowie dem TAP-SAFE.



TAP DIPRO: Im Mittelpunkt der Forschung stand die erfolgreiche Fortsetzung der Zusammenarbeit mit der DIPRO-Begleitgruppe (DBG), ein Workshop in Karlsruhe und ein Kommentarprojekt des AP-Recht. Der transdisziplinäre DIPRO-Workshop D („Finanzieller Ausgleich für ein Endlager“) wurde vom ITAS-AP-Recht federführend in Kooperation mit LUH-IW und CAU-LEUP in Karlsruhe durchgeführt. Die Auseinandersetzung mit Kompensationsmodellen diente hier auch der inhaltlichen Vorbereitung noch ausstehender DIPRO-Workshops. Ergänzend wurden in einem Rollenspiel verschiedene „Formen subjektiver Betroffenheit“ durch die Ansiedelung eines Endlagers ermittelt, um durch das TD-Format „Idea Tree“ Hinweise für eine generische Standortvereinbarung festzuhalten. Auf Basis der Auswertung des „DIPRO-Workshops C“ wurde der Entwurf eines DIPRO-Arbeitsberichtes gestartet. Die disziplinären Forschungsarbeiten zur erweiterten 2. Auflage des Gesetzes-Kommentars zum StandAG (Smeddinck et al.) wurden erfolgreich aufgenommen. Wichtige Arbeiten zur Analyse der Endlager-Governance und Lernen nach StandAG, Kernfragen der Regulierung und dazugehörige Narrative sowie zu Policy Packages sind weitgehend veröffentlicht. Neue Aufsatzprojekte zu „Behavioral Administration“ und Robert Alexys „Theorie des allgemeinen praktischen Diskurses“ beziehen sich ebenso auf das Standortauswahl-Verfahren wie Arbeiten zu Long-Term-Governance und lernendem Verfahren, die alle auf das deutsche Standortauswahlverfahren Bezug nehmen. TAP SAFE: Bei einem Workshop mit Mitgliedern aus der zweiten TRANSENS-Begleitgruppe (AGBe) nahm ITAS als „teilnehmender Beobachter“ teil. Ebenso wird bei der Fortschreibung des transdisziplinären Konzeptes mitgearbeitet. TAP EDU: Fortführung des ITAS-Textseminars zu einschlägiger Forschungsliteratur, die sowohl transdisziplinäre Themen aufgreifen als auch interdisziplinäre neue Wissensbestände für HAFF und DIPRO erschließen. Ebenso arbeitete ITAS rechts- und politikwissenschaftlich bei der Ringvorlesung „Kernenergie und Brennstoffkreislauf“ an der LUH-Hannover mit und vertiefte im ITAS-Doktoranden-Begleitprogramm durch Vorträge und Workshops den Zusammenhang zwischen endlagerspezifischer Grundlagenforschung und Politikberatung.

#### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Fortschreibung der Planung für die transdisziplinären Elemente, für die ITAS in HAFF und DIPRO verantwortlich ist (z.B. des DIPRO-Workshops B).
- Vertiefung und Umsetzung der Vorhaben aus dem 1. HAFF-Arbeitsbericht „Verzahnungen, Haltepunkte und Wissenskonflikte“ (interdisziplinäre Ausarbeitung der HAFF-„Zukunftspfad(e)“).
- Auswertung des ITAS-HAFF-AP „Verwaltungshandeln“.
- Fortführen und Planung neuer Weiterbildungsaktivitäten zum Thema „TA und Governance im selbstlernenden Verfahren“.
- Kommentierung des StandAG für die Neuauflage des Kommentars, Smeddinck (Hrsg.).

#### 5. Berichte, Veröffentlichungen

- Grunwald, Armin (2022): The German case for dealing with high-level radioactive waste: taking a socio-technical approach to address a socio-technical problem - chances and risks. In: K.-J. Röhlig (Hg.): Nuclear Waste. Management, disposal and governance. IOP Publishing Ltd., S. 16-1–16-17
- Kirchhof, Astrid M. (2022): Rezension zu Daniel Romberg: Atomgeschäfte. Die Nuklearexportpolitik der Bundesrepublik Deutschland 1970-1979, Paderborn. In: *Technology and Culture* 63 (2), S.546 - 547
- Kirchhof, Astrid M.; Koshelev, Yaroslav; Mantey, Florian et al. (2022): Uranbergbau der DDR als Erbmasse der Bundesrepublik Deutschland – Sanierung der Wismut im Zeitzeug:innengespräch - ein Werkstattbericht, in: Deutsches Bergbau Museum (Hrsg.), *Bergbaufolgelandschaften im deutsch-deutschen Vergleich*, Oldenburg, S. 135-162
- Kuppler, Sophie; Bechthold, Elske (2022): Werte, Wissen und Interessen: Konflikte im Kontext der deutschen und Schweizer Endlagerpolitik. In: *Soziologie und Nachhaltigkeit* 8 (1), S. 24 – 63. <https://doi.org/10.17879/sun-2022-4308>
- Smeddinck, Ulrich (2022): Demokratisierung der Technologieabwicklung: Das Standortauswahlverfahren für ein Endlager in Deutschland als Antidot zur Digitalisierung, in: A. Bogner et al. (Hg.) *Digitalisierung und die Zukunft der Demokratie – Beiträge aus der Technikfolgenabschätzung*, Baden-Baden, S. 143 – 154
- Smeddinck, Ulrich; Roßmann, Maximilian (2022): Narrative als Regulierung? – Grundlagen, Ansätze, Verfassungsrecht. In: *Deutsches Verwaltungsblatt* 137 (3), S. 137 – 145
- Scheer, Dirk; Schmidt, M.; Dreyer, M.; Schmieder, L.; Arnold, A. (2022): Integrated Policy Package Assessment (IPPA): A Problem-Oriented Research Approach for Sustainability Transformations. In: *Sustainability* 14 (3), 1218, doi:10.3390/su14031218

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Leibniz Universität Hannover, Welfengarten 1, 30167 Hannover		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11849F</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt F		
<b>Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit</b> Bereich D2: Sozio-technische Fragestellungen, Feld:2.1		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2019 bis 30.09.2024	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2022 bis 30.06.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 3.473.288,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Walther	

### 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

In TRANSENS soll transdisziplinär geforscht werden: Die interessierte Öffentlichkeit und andere außerakademische Akteure werden planvoll in Forschungskontexte, konkret in Transdisziplinäre Arbeitspakete (TAP) eingebunden. Die Möglichkeiten transdisziplinärer Forschung in der nuklearen Entsorgung werden im Verbund systematisch reflektiert (Transdisziplinaritätsforschung). Spezielle Aktivitäten zielen auf Nachwuchsförderung und Kompetenzerhalt. LUH IRS/IW und ETH Zürich tragen zu allen vier TAP bei: Flexibilität statt linearer Ablauf des Verfahrens: schrittweises Vorgehen, Haltepunkte im Verfahrensablauf, die Option von begründeten Rückschritten und die Reaktion auf neue Forschungsergebnisse sind die Themen der transdisziplinären Forschung im TAP HAFF. Dialog und Diskurs sind Schlüssel zur Verständigung. Wie muss der langwierige Prozess gestaltet werden, um dafür gute Bedingungen auf dem Entsorgungspfad zu schaffen? Das ist Gegenstand der transdisziplinären Forschung im TAP DIPRO. In einem Verfahren, das die Rückholung eingelagerter Abfälle im Falle einer ungünstigen Entwicklung des Lagers vorsieht, muss man sich frühzeitig Gedanken machen über Monitoring-Strategien, Entscheidungswege, Entscheidungsträger und Verantwortlichkeiten. Dies ist Gegenstand des TAP TRUST. Im TAP SAFE wird transdisziplinär untersucht, ob und inwieweit Sichtweisen von Nicht-Spezialisten nahelegen, das Konzept des Safety Case anzupassen oder weiterzuentwickeln, um so die Diskurs- und Beratungsfähigkeit zu verbessern.

### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

#### IRS:

TAP TRUST: Modul 1: Übergreifender Rahmen des TAP TRUST und Leitung der AGBe  
Modul 2: Transdisziplinäre Erarbeitung eines Programms zur Umweltüberwachung

TAP SAFE: Modul 6: Die Rolle der radioökologischen Modellierung im Safety Case

EDU: Aus- und Weiterbildung

#### IW:

TAP HAFF: Modul 1: Pfadabhängigkeit als Risiko und Herausforderung

Modul 2: Raumwirkungen und Governance

Modul 3: Konzeptionelle Grundlagen und Basisinformationen

TAP DIPRO: Workshop D: Darstellung technischer Randbedingungen

Workshop F: Transdisciplinarity meets reality – Lessons learned

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

IRS: TAP TRUST (Modul 1): Am 6./7.5. fanden Workshops zu den Themen Monitoring und Safety Case mit der AGBe statt. Der Artikel für die Fachzeitschrift *Risk Analysis* wurde veröffentlicht. Für die geplante Durchführung einer zweiten Bevölkerungsumfrage zum Thema Vertrauen wurden ein neues theoretisches

Design entwickelt und Erkenntnisse aus der ersten Befragung operationalisiert. Parallel fanden konzeptionelle Vorplanungen für die geplanten psychologischen Experimente in Abstimmung mit Kollegen (TUB, TUC, GRS) statt.

TAP TRUST (Modul 2): Im Rahmen einer Reihe öffentlicher Veranstaltungen ist es gelungen, mit wichtigen Praxispartnern in einen konstruktiven Dialog einzutreten. Dies unterstreicht der Besuch von engagierten Bürgern am IRS sowie die Kooperation von Messvorhaben mit der BI AufPASSEN e.V. Mit der IGS Wolfenbüttel konnten Termine für die Übernahme von Unterrichtseinheiten sowie die Planung von Messvorhaben an der Bürgermessstelle im kommenden Schuljahr initiiert werden.

TAP SAFE (Modul 6): Eine kritische Analyse des Entwurfs zur *Berechnungsgrundlage Dosisabschätzung* (BeGru) wurde durchgeführt. Die Ergebnisse wurden beim BASE eingereicht und teils im Rahmen eines Fachworkshops diskutiert. Zudem wird ein Computermodell zur Dosisabschätzung auf Basis der BeGru entwickelt.

EDU: Die Ringvorlesung wurde und wird wie geplant einmal wöchentlich von abwechselnden Referenten aus dem Projekt gehalten. Der Vorlesungsplan für die Sommerschule wurde wie geplant in Zusammenarbeit mit den Partnern des Projektes erarbeitet.

IW: TAP HAFF: Basierend auf den IW-Arbeitszielen erfolgte in Zusammenarbeit mit KIT-INE, TUB-iBMB und ÖI die Fortführung der Arbeiten zum Thema Entsorgungspfade sowie die Beschreibung der Pfadabhängigkeiten nach Stand AG (gemeinsam mit KIT-ITAS). Bezogen auf Ungewissheiten sind Arbeiten durchgeführt worden, mittels derer die Entscheidungsfindung für das System „Technische Barriere“ und dafür notwendige Begründungen erforscht werden. Teilnahme an der TRANSENS-Ringvorlesung.

IW: TAP DIPRO: Im Rahmen der TD-Taskforce wurde mit der DIPRO-Begleitgruppe (DBG) gearbeitet. Durchgeführt wurde etwa Workshop D „Freiwilligkeit und Kompensation“. Zentrales Ziel war es, zu erforschen, wie sich die Haltung der Teilnehmenden zum Thema Kompensation durch Perspektivwechsel verändern kann. TAP-übergreifend wurde mit SAFE und TRUST am Thema Ungewissheiten gearbeitet.

#### 4. Geplante Weiterarbeiten

IRS: TAP TRUST (Modul 1): Der Fragebogen wird in Kürze getestet, bevor er über den Online-Marktforschungsdienst Bilendi gestartet wird. Im Anschluss werden die psychologischen Experimente umgesetzt. Außerdem wird an weiteren Vorträgen (u.a. INSIST, Berlin) und Veröffentlichungen gearbeitet.

TAP TRUST (Modul 2): Im Rahmen eines Seminarfachs „Medizinphysik“ sollen Facharbeiten durch Schüler\*innen der IGS Wallstraße (Wolfenbüttel) messtechnisch begleitet und die Fachlehrerin in Gamma-Spektrometrie geschult werden. Eine Bachelor-Arbeit (Physik) wird im Rahmen von TRANSENS und in Kooperation mit der Bürgerinitiative AufPASSEN e.V. Untersuchungen zum C-14 Gehalt in Baumstämmen aus der Asse durchführen. In Zusammenarbeit mit dem „Strahlenschutz-Stammtisch werden in der Nähe des Asse-Diffusors umfangreiche Bodenuntersuchungen durchgeführt, die sich zur Verstetigung über die kommenden Jahre eignen.

TAP SAFE (Modul 6): Zurzeit wird nach einem Vergleich radioökologischer Modelle aus der Literatur die Relevanz der Expositionspfade im kühlgemäßigten Klima ermittelt. Weiterhin soll bestimmt werden, wie unsicher und sensitiv die zugehörigen Parameter sind. Geplant ist zudem ein AGBe-Workshop gemeinsam mit den Modulen SAFE 4 & 5.

(EDU): Vom 19.08.-28.08.2022 wird die erste TRANSENS Sommerschule durchgeführt. Die Ringvorlesung wird erneut für die kommenden zwei Semester organisiert. Vom 07.-09.09. wird ein Bearbeiter\*innen-Treffen in Braunschweig stattfinden.

IW: TAP HAFF: Fortführung der TAP-übergreifenden Arbeiten zu Ungewissheiten mit dem Fokus auf der „Technischen Barriere“. Weitere Aufbereitung einer Wissensbasis zu diesem Themenfeld zur Vorbereitung transdisziplinärer Wissensvermittlung unter dem Blickpunkt Komplexität/Vollständigkeit vs. Verständlichkeit/Vertrauen. Erste konkrete Planungen zur Durchführung des gemeinsamen TD-Moduls mit ITAS zum Themenschwerpunkt „Endlagerbehälter und Kommunikation“. Weiterführung der Beschreibungen zu Pfadabhängigkeiten.

TAP DIPRO: Weitere Zusammenarbeit mit der DBG zur Auswertung der Ergebnisse sowie Co-Produktion der Ergebnisse des Rollenspiels im Rahmen des Workshops D. Weiterarbeit im Evaluationsteam.

#### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Auswahl:

Seidl, R., Drögemüller, C., Krütli, P., Walther, C. (2022): The Role of Trust and Risk Perception in Current German Nuclear Waste Management, Risk Analysis. Advance online publication

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Öko-Institut. Institut für angewandte Ökologie e. V., Merzhauser Str. 173, 79100 Freiburg im Breisgau		<b>Förderkennzeichen:</b>  <b>02 E 11849G</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt G		
<b>Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit</b> Bereich D2: Sozio-technische Fragestellungen, Feld:2.1		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2019 bis 30.09.2024	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2022 bis 30.06.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 505.379,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Brohmann	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

In TRANSENS soll transdisziplinär geforscht werden: Die interessierte Öffentlichkeit werden planvoll in Forschungskontexte, konkret in vier Transdisziplinäre Arbeitspakete (TAP) eingebunden. Die Möglichkeiten transdisziplinärer Forschung in der nuklearen Entsorgung werden im Verbund systematisch reflektiert (Transdisziplinaritätsforschung). Weitere Aktivitäten zielen auf Nachwuchsförderung und Kompetenzerhalt. Die Expertise des Öko-Instituts wird insbesondere in die TAPs HAFF und SAFE einbezogen.

Das TAP HAFF fokussiert auf die Flexibilität des Verfahrens, die statt eines linearen Ablaufs, ein schrittweises Vorgehen ermöglicht, das Haltepunkte im Ablauf und die Option von Rückschritten sowie die Reaktion auf neue Forschungsergebnisse vorsieht. Das TAP SAFE fokussiert u. a. auf Fragen der Kommunikation und des Umgangs mit Ungewissheiten im Rahmen des Safety Case (SC). Dabei wird transdisziplinär untersucht, ob und inwieweit Sichtweisen von Nicht-Spezialisten nahelegen, das Konzept des SC anzupassen oder weiterzuentwickeln.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

### TAP HAFF: Handlungsfähigkeit und Flexibilität in einem reversiblen Verfahren

Das TAP gliedert sich in drei Module und beinhaltet folgende Arbeitsschritte:

- a) Literaturrecherche,
- b) Experten-Interviews zu Raumwirkungen von kerntechnischen Entsorgungsanlagen,
- c) Transdisziplinärer Workshop mit Praxisakteuren zu Umgang mit räumlichen Transformationen, Entwicklung eines raumsensiblen Long-term Governance-Konzeptes,
- d) Visuelles Experiment zur Wirkung von räumlichen Transformationen (Landschaftswandel) mit Praxisakteuren,
- e) Transdisziplinärer Workshop mit Stakeholdern und interessierter Öffentlichkeit zur Prüfung und Weiterentwicklung der konzeptionellen Ideen,
- f) Analyse der Interviews zur Entwicklung partizipativer Ausgestaltungsempfehlungen; Erfahrungen aus dem Schweizer Fall,
- g) Synthese der Ergebnisse und Entwicklung von Handlungsempfehlungen zum Umgang mit raumzeitlichen Spezifika unter Berücksichtigung von Haltepunkten und Rücksprüngen.

### TAP SAFE: Stakeholder-Perspektiven und Transdisziplinarität

Das TAP gliedert sich in sieben Module, an vier Modulen ist das Öko-Institut beteiligt.

In SAFE 2 wird ein Beitrag zur methodischen Konzeption für die empirischen Untersuchungen mit transdisziplinärem Ansatz entwickelt. In SAFE 3 unterstützt das Öko-Institut den Diskurs zur Erfassung von Kriterien für einen SC. SAFE 4 widmet sich der Ergebnisdarstellung und Vermittlung von Modellrechnungen unter Einbeziehung kommunikativer Anforderungen. SAFE 7 widmet sich der Auswertung und der Entwicklung von Empfehlungen der fortlaufenden Beobachtungen der Module 2, 3 und 4.

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

Die Projektleitung des Teams Öko-Institut hat von Frau Brohmann zu Frau Neles, die Stellvertretung von Frau Neles zu Frau Mbah gewechselt. Vom 16. bis 18.3.22 fand ein TRANSENS Gesamttreffen in Zürich statt (hybrid). Für übergeordnete Aufgabenstellungen (insbesondere zur Selbstevaluation) haben wir an verschiedenen Treffen teilgenommen und zur Erarbeitung von Leitfragen und Kriterien beigetragen. In beiden TAPs wurden die regelmäßigen Arbeitstreffen überwiegend im digitalen Format fortgesetzt.

TAP HAFF: Am 27.4. wurden erste Ergebnisse und Vorgehensweisen mit dem Td Beirat diskutiert. Modul 1: Unter dem Stichwort Zukunftspfade wurden Kurzbeschreibungen der Pfade verfasst, für die im nächsten Schritt Langbeschreibungen erstellt werden.

Modul 2: Die Workshops in den zur Untersuchung ausgewählten Regionen wurden im Februar durchgeführt. In der Region Görlitz kam kein Workshop zustande, daher werden aktuell ergänzende Interviews durchgeführt. Darüber hinaus wird das visuelle Experiment in Kooperation mit weiteren HAFF-Teams vorbereitet.

Modul 3: Die Fallstudie zu Oberflächenanlagen in der Schweiz wurde als TRANSENS Bericht veröffentlicht. Am Gesamttreffen wurden im Rahmen eines World Café Formats die Ergebnisse der Fallstudie zu Oberflächenanlagen in der Schweiz vorgestellt und diskutiert.

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.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

In den einzelnen Arbeitspaketen sind folgende Tätigkeiten vorgesehen:

TAP HAFF: In Modul 1 werden Langfassungen der Pfadbeschreibungen zu den identifizierten Zukunftspfaden unter Herausarbeitung insbesondere von Haltepunkten, Pfadänderungen & -gabelungen sowie Reversibilität erarbeitet. In Modul 2 wird die Forschung zum regionalen Vergleich räumlicher Identitäten und Wahrnehmungen von Infrastrukturanlagen fortgesetzt (Interviewführung sowie Analyse der Workshops und der Interviews). Außerdem erfolgt die Umsetzung des zweiten Td-Formats (visuelles Experiment) im 2. Hj. 2022. Zudem wird die Auswertung des ersten Td-Formats abgeschlossen.

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**

Fallstudie zur Platzierung von Oberflächenanlagen bei der Tiefenlagerung in der Schweiz (TRANSENS Bericht)

Poster zu den Ergebnissen der Fallstudie, März 2022

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Technische Universität Berlin, Straße des 17. Juni 135, 10623 Berlin		<b>Förderkennzeichen:</b>  <b>02 E 11849H</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt H		
<b>Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit</b> Bereich D2: Sozio-technische Fragestellungen, Feld:2.3		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2019 bis 30.09.2024	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2022 bis 30.06.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 362.577,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. von Hirschhausen	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

In TRANSENS soll transdisziplinär geforscht werden: Die interessierte Öffentlichkeit und andere außerakademische Akteure werden planvoll in Forschungskontexte, konkret in Transdisziplinäre Arbeitspakete (TAP) eingebunden.

Die Möglichkeiten transdisziplinärer Forschung in der nuklearen Entsorgung werden im Verbund systematisch reflektiert (Transdisziplinaritätsforschung). Spezielle Aktivitäten zielen auf Nachwuchsförderung und Kompetenzerhalt.

Dialog und Diskurs sind Schlüssel zur Verständigung. Wie muss der langwierige Prozess gestaltet werden, um dafür gute Bedingungen auf dem Entsorgungspfad zu schaffen? Das ist Gegenstand der transdisziplinären Forschung im TAP DIPRO.

Das Fachgebiet für Wirtschafts- und Infrastrukturpolitik erarbeitet im TAP DIPRO auf der Grundlage disziplinärer und interdisziplinärer Forschung eine Bewertung der volkswirtschaftlichen Vorteilhaftigkeit von Organisationsmodellen bzw. Governance-Strukturen an der Schnittstelle zwischen den Prozessen des Rückbaus, der Lagerung und der Standortsuche. Unter Berücksichtigung ingenieurwissenschaftlicher Erkenntnisse sollen mögliche Synergieeffekte und Hindernisse, die eventuell Verzögerungen oder Kostensteigerungen verursachen könnten, herausgearbeitet werden. Des Weiteren erarbeitet bzw. eruiert das Fachgebiet, basierend auf Wissen über monetäre und nicht-monetäre Anreizstrukturen, in Kooperation mit anderen Partnern verschiedene Kompensationsszenarien und gesellschaftliche Möglichkeiten distributiver Gerechtigkeit im Umgang mit Lasten- und Verantwortungsverteilung.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Das Arbeitsprogramm des TAP Dipro gliedert sich in drei Module, wovon ein Modul der wissenschaftlichen Vorbereitung und ein Modul der Synthese dient. Im Zentrum steht das Praxismodul mit einer Reihe aus drei Workshops für Teilnehmer aus dem nichtakademischen Bereich, in denen jeweils unterschiedliche Aspekte von Gerechtigkeit, Recht und Governance behandelt werden. Bei der Workshop-Organisation wechseln sich die DIPRO-Partner ab. Alle Projektpartner (im TAP DIPRO) sind bei den Workshops vertreten.

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- 13. – 14. 01.2022 AP Leiter Treffen
- Der Mitarbeiter Fabian Präger nimmt regelmäßig an Telkos im Rahmen der DIPRO 4er Runde zur Planung und Vorbereitung von Entscheidungen teil
- Prof. Dr. Christian von Hirschhausen und der Mitarbeiter Fabian Präger nehmen an den Terminen des DIPRO Korridors teil, in welchen unterschiedliche DIPRO Themen diskutiert werden. Zuletzt war auch die Ausgestaltung der Selbst-Evaluation des TAP DIPRO wichtiges Arbeitsthema
- Der Mitarbeiter Fabian Präger hat am 5. Bearbeiter\*innentreffen am 22.02.2022 online teilgenommen
- Der Mitarbeiter Fabian Präger hat am TRANSENS-Treffen an der ETH Zürich am 16. – 18.03.2022 teilgenommen
- Prof. Dr. Christian von Hirschhausen hat am Teamleitertreffen im Zuge des TRANSES-Treffens am 18.03.2022 teilgenommen
- Der Mitarbeiter und TD-Beauftragte Fabian Präger hat am DIPRO Workshop D in Karlsruhe am 07. – 08.05.2022 zum Thema: „Finanzieller Ausgleich für die Ansiedlung eines Endlagers? Grundlagen, Erfahrungen, Standortvereinbarung“ teilgenommen
- Der Mitarbeiter und TD-Beauftragte Fabian Präger arbeitet in regelmäßig stattfindenden Terminen zur Organisation der DIPRO Begleitgruppe (DBG) mit. Zusätzlich an verschiedenen Arbeitsterminen zusammen mit den Mitgliedern der DBG. Dabei werden Themen aus dem Themenkorridor der DBG behandelt, informelle „Teeküchen“ abgehalten und Organisationsthemen im Zusammenhang mit der DBG behandelt. In den letzten Monaten wurde der Fokus dabei auf die Selbstevaluationen der DBG gelegt. Die Teilnahme an verschiedensten TD-Interessierten Treffen gehören zu weiteren Arbeitsgebieten des TD-Beauftragten.
- Das Team TUB hat seinen Beitrag zur Selbstevaluation von DIPRO geleistet und verschriftlicht
- Team TUB und FFN: Diskussion des Arbeitsstandes zur „Atomwende“ im DIPRO Korridor am 05.05.2022
- Weitere Arbeit am wissenschaftlichen Papier „Die Atomwende in Deutschland als Teil der (langfristigen) Energiewende und Bedingung für einen guten Endlagersuchprozess“ im Austausch mit Achim Brunnengräber und Team FFN
- Fortlaufende Vorbereitung und Ergänzung für TRANSENS Ringvorlesungen „Systemgut Atomkraft - Eine soziotechnische Einführung“ und „Politische Ökonomik der Atomkraft“ für das Wintersemester am 25.10.2022 (Alexander Wimmers / Prof. Dr. Christian von Hirschhausen) und 15.11.2022 (Prof. Dr. Christian von Hirschhausen)
- 2022-05-24: Arbeitstreffen mit Team FFN zur Vorbereitung Workshop B, Forschungsthema „Atomwende“ und „Wicked-Financing“
- Prof. Dr. Christian von Hirschhausen hat an der Teamleitersitzung in Hannover am 12. – 13.07.2022 teilgenommen

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Workshop B (geplant 25. – 26.11.2022) (Meilenstein 7) unter Leitung von FU Berlin wird konzipiert und geplant
- Fertigstellung der Veröffentlichung mit vorläufigem Arbeitstitel: „Atomwende / atompolitische Wende“ - im Diskurs eines „guten Standortsuchprozesses“ für ein Endlager in Deutschland“
- Konzipierung und Erarbeitung des Fotoband-Projektes: Einfach mal abschalten...und dann?“ mit „Wanderausstellung“, zusammen mit Studierenden der TUB
- Fortführung des Arbeitsteilprogramms zum Themenkomplex „wicked financing“
- Datensuche zu internationalen Erfahrungen mit Endlagerfinanzierung und -organisationsmodellen

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Technische Universität Carolo-Wilhelmina zu Braunschweig, Universitätsplatz 2, 38106 Braunschweig		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11849I</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt I		
<b>Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit</b> Bereich D2: Sozio-technische Fragestellungen, Feld:2.3		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2019 bis 30.09.2024	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2022 bis 30.06.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 1.239.091,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Stahlmann	

### 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Im Verbundvorhaben TRANSENS wird erstmalig in Deutschland transdisziplinäre Forschung zur nuklearen Entsorgung in größerem Maßstab betrieben. Die interessierte Öffentlichkeit und andere außerakademische Akteure werden planvoll in Forschungskontexte, konkret in Transdisziplinäre Arbeitspakete (TAP) eingebunden:

- HAFF: Handlungsfähigkeit und Flexibilität in einem reversiblen Verfahren
- SAFE: Safety Case: Stakeholder-Perspektiven und Transdisziplinarität
- TRUST: Technik, Unsicherheiten, Komplexität und Vertrauen
- DIPRO: Dialoge und Prozessgestaltung in Wechselwirkung von Recht, Gerechtigkeit und Governance

### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

In einem Verfahren, das die Rückholung eingelagerter Abfälle im Falle einer ungünstigen Entwicklung des Lagers vorsieht, muss man sich frühzeitig Gedanken machen über Monitoring-Strategien, Entscheidungswege, Entscheidungsträger und Verantwortlichkeiten. Dies ist Gegenstand des TAP TRUST.

Flexibilität statt linearer Ablauf des Verfahrens: schrittweises Vorgehen, Haltepunkte im Verfahrensablauf, die Option von begründeten Rückschritten und die Reaktion auf neue Forschungsergebnisse sind die Themen der transdisziplinären Forschung im TAP HAFF.

Dialog und Diskurs sind Schlüssel zur Verständigung. Wie muss der langwierige Prozess gestaltet werden, um dafür gute Bedingungen auf dem Entsorgungspfad zu schaffen? Das ist Gegenstand der transdisziplinären Forschung im TAP DIPRO.

Das IGG der TU Braunschweig ist in TAP TRUST eingebunden und bearbeitet Fragestellungen zu Monitoring und zur Akzeptabilität von Ungewissheiten während der Beobachtungsphase und einer Rückholung.

Das iBMB der TU Braunschweig ist in den TAPs HAFF und DIPRO eingebunden und entwickelt und visualisiert dazu idealtypische Konzepte für obertägige Anlagen von Endlagern. Dabei wird der komplette Lebenszyklus der Bauwerke betrachtet. Wesentliches Element ist dabei ein lernfähiges Lebenszyklusmanagementsystem.

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Das IGG hat die Forschungen innerhalb des TAP TRUST zum Thema Rückholung und am TAP übergreifenden Thema Ungewissheiten fortgesetzt. Es wurde ein parametrisiertes numerisches Modell einer Einlagerungsstrecke im Tonstein entwickelt, mit dem erste thermische und mechanische Berechnungen durchgeführt wurden. Dieses wurde der AGBe auf dem Workshop am 06.05.2022 vorgestellt und sich



über Wünsche zur weiteren Zusammenarbeit ausgetauscht. Im TAP übergreifenden Thema Ungewissheiten beteiligt sich das IGG an dem geplanten Sammelband mit einem Beitrag zu technischen Ungewissheiten in der geotechnischen und geologischen Barriere sowie am Herausgaberteam.

Das iBMB hat zusammen mit dem Öko-Institut und der Universität Kassel weiter am virtuellen Experiment zur Raumwirkung der Oberflächenanlagen gearbeitet. Die hierfür am iBMB entwickelten 3D-Modelle für obertägige bauliche Anlagen am Endlagerstandort wurden weitestgehend finalisiert. Das visuelle Experiment wird im Oktober 2022 in Form eines Workshops mit Teilnehmer\*innen aus der Bevölkerung in Kassel stattfinden. Die geplanten Inhalte des Workshops wurden weiterhin am 05.07.2022 auf der „3rd Conference on Key Topics on Deep Geological Disposal – Challenges of a Site Selection Process: Society – Procedures – Safety – DAEF 2022“ unter Mitarbeit des iBMB von Melanie Mbah (Öko-Institut) mit dem Titel „Spatial effects of surface facilities for final disposal: Perceptions of the same and impact on place attachment – A transdisciplinary experimental setting“ vorgestellt.

Im TAP DIPRO organisiert das iBMB gemeinsam mit der Christian-Albrechts-Universität zu Kiel eine Workshopreihe zum Thema „Standortverantwortung und Zwischenlagerung“, welche an drei Zwischenlagerstandorten in Deutschland stattfinden werden. Der erste Workshop wird vom 14.-15.10.2022 in Brokdorf stattfinden. Hierfür arbeiten Uni Kiel und iBMB derzeit an einem Konzeptentwurf.

Weiterhin haben sich das IGG sowie das iBMB auch in diesem Jahr an der Ringvorlesung „Nachhaltigkeit im Bauwesen“ in den Bachelorstudiengängen Bauingenieurwesen und Wirtschaftsingenieurwesen FR Bau an der TU Braunschweig beteiligt, welche erstmals in Präsenz stattfand. Die Veranstaltung wurde erneut in Form eines transdisziplinären Workshops im World-Café Format durchgeführt. Innerhalb der TRANSENS-Ringvorlesung des IRS Hannover wurde von Volker Mintzloff ein Beitrag zur Geologie, Monitoring und Rückholbarkeit geleistet.

Darüber hinaus haben das IGG und das iBMB am TRANSENS-Arbeitstreffen vom 15.-18.03.2022 in Zürich teilgenommen. Hier wurde in einem Vortrag von Thorsten Leusmann zum Thema „TD-Experiment in HAFF: Handlungsfähigkeit und Flexibilität durch adaptive Lebensdauerprognose von Zwischen- & Eingangslagerbauwerken“ die Arbeiten im TAP HAFF zum Thema Lebensdauermanagementsystem vorgestellt.

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

Das IGG arbeitet an der Weiterentwicklung des Demonstrators „Rückholung“ und führt umfassende thermische, mechanische und thermisch-mechanisch gekoppelte numerische Berechnungen durch. Es bereitet den Workshop mit der AGBe im Herbst 2022 vor. Dafür wird außerdem die Thematik „Rückholung in Tonstein“ allgemeinverständlich ausgearbeitet. Weiterhin ist eine Veröffentlichung im Sammelband zum Thema Ungewissheiten geplant.

Das iBMB beteiligt sich weiter an der Ausgestaltung der TD-Elemente im Rahmen des virtuellen Experiments zur Raumwirkung der Oberflächenanlagen im TAP HAFF sowie des Workshops zur Standortverantwortung und Zwischenlagerung im TAP DIPRO. Ebenso wird anhand der entwickelten idealtypischen Konzepte für obertägige Anlagen von Tiefenlagern weiter an der Entwicklung eines Lebensdauermanagementsystems gearbeitet. Zusätzlich zu den derzeit laufenden studentischen Arbeiten zum Thema Lebensdauermanagement sind weitere Arbeiten zum Thema Dauerhaftigkeit geplant.

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

M. Mbah, J. Neles, S. Bremer, T. Leusmann, D. Lowke (2022): Spatial effects of surface facilities for final disposal: Perceptions of the same and impact on place attachment – A transdisciplinary experimental setting, 3rd Conference on Key Topics in Deep Geological Disposal, Köln, 04.-06. Juli 2022

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Universität Kassel, Mönchebergstr. 19, 34125 Kassel		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11849J</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt J		
<b>Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit</b> Bereich D2: Sozio-technische Fragestellungen, Feld:2.2		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2019 bis 30.09.2024	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2022 bis 30.06.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 327.569,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Sträter	

### 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

In TRANSENS soll transdisziplinär geforscht werden: Die interessierte Öffentlichkeit und andere außerakademische Akteure werden planvoll in Forschungskontexte, konkret in vier Transdisziplinäre Arbeitspakete (TAP) eingebunden. Die Möglichkeiten transdisziplinärer Forschung in der nuklearen Entsorgung werden im Verbund systematisch reflektiert; spezielle Aktivitäten zielen auf Nachwuchsförderung und Kompetenzerhalt.

Im TAP HAFF soll Flexibilität statt ein linearer Ablauf des Verfahrens erarbeitet werden durch ein schrittweises Vorgehen, mit Haltepunkten im Verfahrensablauf, der Option von begründeten Rückschritten und Reaktion auf neue Forschungsergebnisse.

Im TAP SAFE wird untersucht, ob und inwieweit Sichtweisen von Nicht-Spezialisten nahelegen, das Konzept des Safety Case anzupassen oder weiterzuentwickeln, um so die Diskurs- und Beratungsfähigkeit zu verbessern. Weiterhin wird untersucht, ob und inwieweit Sichtweisen von Nicht-Spezialisten nahelegen, das Konzept des Safety Case anzupassen oder weiterzuentwickeln, um so die Diskurs- und Beratungsfähigkeit zu verbessern.

### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Das Fachgebiet Arbeits- und Organisationspsychologie beteiligt sich insbesondere am TAP HAFF und TAP SAFE mit folgenden Arbeitspaketen:

- HAFF AP1: Psychologische Aspekte bei der Entscheidungsfindung für Haltepunkte und Rückschritte.
  - HAFF AP2: Unterstützung des schrittweisen Verfahrens hinsichtlich einer positiven Sicherheits- und Fehlerkultur.
  - HAFF AP3: Anwendung der Methodik auf Szenarien.
- sowie
- SAFE AP1: Bestandsaufnahme ganzheitlicher, systemischer Effekte der menschlichen Zuverlässigkeit auf den Umgang mit Sicherheitsanforderungen.
  - SAFE AP2: Methode zur Berücksichtigung der Aspekte der menschlichen Zuverlässigkeit in den Einschätzungen und Bewertungen von Ungewissheiten.
  - SAFE AP3: Anwendung der Methodik auf Modellrechnungen und Ergebnisdiskussionen.

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

HAFF AP1: Der Fragebogen zur Bewertung von Entscheidungsqualität wurde im Rahmen von TRANSENS eingesetzt und wird derzeit methodisch evaluiert. Die Ergebnisse werden auf der DAEF Konferenz vorgestellt.

HAFF AP2: Weiterbearbeitung des Arbeitsberichtes für die Umsetzung einer positiven Sicherheits- und Fehlerkultur (in Zusammenarbeit mit dem Öko-Institut und KIT). Zusätzlich werden transdisziplinäre Ansätze mit multimedialer Unterstützung im virtuellen Raum des Fachgebietes entwickelt.

HAFF AP3: Aufbauend auf den Ergebnissen zur guten psychologischen Kommunikationskultur auf dem BASE-Workshop safeND ‚Interdisziplinäres Forschungssymposium für die Sicherheit der nuklearen Entsorgung‘ wurde ein Baustein für psychologisch resiliente Kommunikation in der Interaktion der Akteure‘ aufbereitet. Es wird im Rahmen der TRANSENS- Summerschool vorgestellt.

SAFE AP1: Die Methoden zur Bewertung der menschlichen Zuverlässigkeit hinsichtlich ganzheitlicher, systemischer Effekte auf den Umgang mit Sicherheitsanforderungen wurden abschließend zusammengestellt. Das Gesamtkonzept wurde im Rahmen der Ringvorlesung TRANSENS-EDU vorgestellt.

SAFE AP2: Die Analysen des Einflusses der menschlichen Zuverlässigkeit in den Einschätzungen und Bewertungen von Ungewissheiten auf der Basis der BMU Sicherheitsanforderungen werden zu einem Kapitel des TRANSENS Berichts zu Unsicherheiten zusammengefasst. Eine vertiefende Session zum Thema Sicherheitsanalysen im Vergleich von Deutschland und der Schweiz wurde auf der LoccumTagung moderiert.

SAFE AP3: Mögliche Szenarien zur Demonstration der Bedeutung der Berücksichtigung menschlicher Einflüsse auf die Modellierungsunsicherheit in der geologischen Modellierung als Anwendungsfeld wurden untersucht und die Untersuchungen werden derzeit ausgewertet (in Zusammenarbeit mit TU Clausthal).

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

HAFF AP1: Das entwickelte Fragebogenverfahren wird auf ausgewählte Fragestellungen des Projektes angewandt; auch sollen zentrale Akteure gewonnen werden, das Instrument einzusetzen.

HAFF AP2: Weiteres Ausarbeiten des Arbeitsberichts zur Kommunikationskultur für spezifische Anwendungsszenarien im Rahmen der Endlagersuche (beispielsweise: Bürgerbeteiligung, Präsentation von Forschungsergebnissen, Umgang mit Unsicherheiten und Ungewissheiten). Vorstellung der Berichtsthemen auf der TRANSENS-Summer-School in 2022.

HAFF AP3: Weiterführung der methodischen Integration von Kommunikationskultur und TD Ansatz auf Basis der Ergebnisse des BASE Workshop ‚Transdisziplinärer Prozess und psychologisch resiliente Kommunikation in der Interaktion der Akteure‘. Vorbereitung eines multimedialen Einsatzes im Rahmen der Fragestellungen zum Raumempfinden.

SAFE AP1: Vorbereiten eines Berichtes mit Empfehlungen für die Berücksichtigung der menschlichen Zuverlässigkeit beim Umgang mit den BMU Sicherheitsanforderungen.

SAFE AP2: Demonstration der Aspekte menschlicher Zuverlässigkeit anhand ausgewählter Anforderungen aus der Synopse zu den BMU Sicherheitsanforderungen (als Bestandteil des Berichtes zu AP1).

SAFE AP3: Exemplarische Anwendung der Methodik zur Bewertung des Einflusses menschlicher Zuverlässigkeit bei beispielhaften Endlager-Fragestellungen (nicht allein der geologischen Modellierung).

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

Englisch, F. & Sträter, O. (2022): Cognitive Biases and Group Biases in Organizations - Development of a Questionnaire for the Bias-Related Diagnosis of Planning Processes. DAEF Conference. Cologne.

Smeddinck, U., Röhlig, K., & Sträter, O. (2022, in press): Positionspapier zum Lernenden Verfahren. Berliner Wissenschaftsverlag, Berlin.

Sträter, O. (2022, in press): Bedeutung menschlicher Faktoren für eine dauerhafte Sicherheit von Entsorgungsoptionen. Beitrag zum Sammelband ‚Long Term Governance‘.

Other, A. & Muxlhanga, H., Lux, K.-H. & Sträter, O. (2022, in press): Umgang mit Modellierungsungewissheiten. Beitrag zum Sammelband ‚Ungewissheiten‘ des TRANSENS Projektes.

Sträter, O. (2022, in press): Grenzen des Barrieredenkens und Faktor Mensch. Beitrag zum Sammelband ‚Ungewissheiten‘ des TRANSENS Projektes.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Forschungszentrum Jülich GmbH, Wilhelm-Johnen-Straße, 52428 Jülich		<b>Förderkennzeichen:</b>  <b>02 W 6279</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Neu- und Weiterentwicklung von Konzepten, Methoden und Techniken für die internationale Kernmaterialüberwachung, insbesondere im Rahmen der nuklearen Entsorgung (SAFE-GUARDS-3)		
<b>Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit</b> Bereich D3: Kernmaterialüberwachung (Safeguards), Feld: 3.1		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.07.2019 bis 31.12.2022	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2022 bis 30.06.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 889.554,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Niemeyer	

### 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Die Bundesregierung soll in ihren Bemühungen unterstützt werden, in Zusammenarbeit mit der IAEO und Euratom das Verifikationssystem zur Nichtweiterverbreitung von Kernwaffen weiterzuentwickeln. Neben der ständigen Verbesserung der Effektivität des Überwachungssystems spielen Gesichtspunkte des Kontrollaufwandes (Effizienz) eine zentrale Rolle. Dieser Aspekt hat besondere Bedeutung bei der erweiterten Aufgabenstellung der IAEO durch das Zusatzprotokoll im Hinblick auf die Entdeckung undeckelter Nuklearmaterialien und Nuklearaktivitäten.

Das Vorhaben baut auf den Ergebnissen der vorangegangenen Vorhaben 02W6184, 02W6218, 02W6232, 02W6243, 02W6259 und 02W6263 auf. Die Arbeiten haben Bezug zum BMWi-Projektförderprogramm „Forschung zur nuklearen Sicherheit 2021-2025“, zu den strategischen Zielen des 7. Energieforschungsprogramm der Bundesregierung (2018) im Rahmen der Entsorgungs- und Endlagerforschung, zum Nationalen Entsorgungsprogramm (2015) sowie zum BMWi-IAEA Joint Programme. Die Arbeiten werden in enger Abstimmung zwischen Regierung, den Kontrollbehörden IAEO und Euratom, Industrie sowie Forschung und Entwicklung geplant und durchgeführt.

### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP6.1: Konzepte zur Kernmaterialüberwachung
  - AP6.1.1: Safeguards-Konzepte für verlängerte Zwischenlagerzeiten
  - AP6.1.2: Safeguards-Konzepte für unterschiedliche Endlagerkonzepte
  - AP6.1.3 Safeguards-Konzepte für kerntechnische Anlagen im Rückbau
- AP6.2: Methoden und Techniken zur Kernmaterialüberwachung
  - AP6.2.1: Einschluss und Überwachung
  - AP6.2.2: Erneute Behälterüberprüfung (Re-Verifikation)
  - AP6.2.3: Methoden zur Entdeckung von unabhängigen Bergbauaktivitäten und Hohlräumen
  - AP6.2.4: Geoinformationstechnologien
- AP6.3: Kooperation, Kommunikation, Kapazitätsaufbau zur internationalen Kernmaterialüberw.
  - AP6.3.1: Kooperation mit der Deutschen Gesellschaft für Auswärtige Politik (DGAP)
  - AP6.3.2: Pflege des nationalen Safeguards-Internet-Portals
  - AP6.3.3: Nationale Gremien
  - AP6.3.4: Internationale Gremien

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP6.1.1: Erarbeitung der konzeptionellen und technischen Anforderungen an die Safeguardsüberwachung der Zwischenlager in Deutschland bis mindestens 2050
- AP6.1.2: Vorbereitung des Promotionsprojekts zur Safeguardsüberwachung eines HAW Endlagers

- AP6.1.3: Beratung der IAEO zur Entwicklung einer allgemeinen Safeguards-Richtlinie für Anlagen im Rückbau; abschließende Prüfung der Richtlinie
- AP6.2.1: Durchführung von Feldtests zur Eignung von 2D- und 3D-Laserscanning im Rahmen von Einschluss und Überwachung der Brennelementbehälter in den Zwischenlagern
- AP6.2.2: Vorbereitung eines Feldtests zur Eignung der Myonen-Tomographie zur Re-Verifikation von Brennelementbehältern in den Zwischenlagern
- AP6.2.3: Beginn eines Promotionsprojekts zur multitemporalen Satellitenbildanalyse im Rahmen der Safeguardsüberwachung von kerntechnischen Anlagen; Vorbereitung eines Fallbeispiels zum Monitoring von HAW Endlagerstandorten
- AP6.3.1: Arbeitsgruppe für Nukleartechnologie und Nonproliferation (AG2N): 5. Sitzung am 22. Juni 2022 (Berlin/hybrid): Prevailing Challenges and Opportunities: 1) Nuclear safety, security, and safeguards in times of crisis and zones of conflict; 2) Challenges and opportunities for the Treaty on the Non-proliferation of Nuclear Weapons (NPT) - Vorbereitung, Durchführung, Nachbereitung
- AP6.3.3: Mitarbeit in der Arbeitsgemeinschaft Kernmaterialüberwachung (AKÜ) sowie im Arbeitskreis Spaltstoffüberwachung des VGB PowerTech e.V.
- AP6.3.4: ESARDA: Leitung von drei Arbeitsgruppen und Mitarbeit in weiteren Arbeitsgruppen; Teilnahme an der Jahrestagung; INMM: Leitung der 'International Safeguards Division', Mitwirkung bei der Vorbereitung der Jahrestagung

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

- AP6.1.1: Fortführung der Erarbeitung der konzeptionellen und technischen Anforderungen an die Safeguardsüberwachung der Zwischenlager in Deutschland bis mindestens 2050
- AP6.1.2: Beginn des Promotionsprojekts zur Safeguardsüberwachung eines HAW Endlagers
- AP6.1.3: Fortführung der Beratung von IAEO und Anlagenbetreibern zur Safeguardsüberwachung von Anlagen im Rückbau
- AP6.2.1: Fortführung der Durchführung und Auswertung von Feldtests zur Eignung von 2D- und 3D-Laserscanning im Rahmen von Einschluss und Überwachung der Brennelementbehälter in den Zwischenlagern
- AP6.2.2: Durchführung und Auswertung eines Feldtests zur Eignung der Myonen-Tomographie zur Re-Verifikation von Brennelementbehältern in den Zwischenlagern
- AP6.2.3: Fortsetzung des Promotionsprojekts zur multitemporalen Satellitenbildanalyse im Rahmen der Safeguardsüberwachung von kerntechnischen Anlagen; Durchführung eines Fallbeispiels zum Monitoring von HAW Endlagerstandorten
- AP6.3.1: Fortsetzung der Arbeitsgruppe für Nukleartechnologie und Nonproliferation (AG2N)
- AP6.3.3: Mitarbeit in der Arbeitsgemeinschaft Kernmaterialüberwachung (AKÜ) sowie im Arbeitskreis Spaltstoffüberwachung des VGB PowerTech e.V.
- AP6.3.4: ESARDA: Leitung einer Arbeitsgruppe und Mitarbeit in weiteren Arbeitsgruppen; INMM: Leitung der 'International Safeguards Division'; INMM/ESARDA: Mitarbeit bei der Vorbereitung der zweiten gemeinsamen Jahrestagung 2023, Wien

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

L. Beumer, I. Niemeyer (2022): Developing a Big Data Framework for Processing Sentinel-2 Data in the Context of Nuclear Safeguards. Evaluation of Apache Airflow, Rasdaman and Google Earth Engine. ESARDA Bulletin - The International Journal of Nuclear Safeguards and Non-Proliferation – 64 (1), pp. 75-87. <https://doi.org/10.3011/ESARDA.IJNSNP.2022.7>

R. Avenhaus, M. J. Canty & T. Krieger (2022): Effort Bounded Inspections. ESARDA Bulletin - The International Journal of Nuclear Safeguards and Non-proliferation, 64(1), 39-47.

<https://doi.org/10.3011/ESARDA.IJNSNP.2022.4>

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Rheinisch-Westfälische Technische Hochschule Aachen, Temp- lergraben 55, 52062 Aachen		<b>Förderkennzeichen:</b>  <b>02 W 6281</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Antineutrino-Detektion zur Überwachung radioaktiver Abfälle (NU-SAFEGUARDS)		
<b>Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit</b> Bereich D3: Kernmaterialüberwachung (Safeguards), Feld: 3.1		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.05.2022 bis 30.04.2025	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.05.2022 bis 30.06.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 344.338,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. 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**

Da es leichte Verzögerungen bei der Personalgewinnung für das Projekt gab, werden die Arbeiten am 01.08.2022 aufgenommen.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Der Fokus des zweiten Halbjahres 2022 wird auf den Arbeitspaketen 1 und 2 liegen. Im Rahmen von AP1 wird für relevante Detektortypen (v. a. Szintillatoren und Zeitprojektionskammern) ein erstes Profil in Hinblick auf den Einsatz zur Überwachung radioaktiver Abfälle erstellt. Sie werden nach Entwicklungsstand, technischen Stärken und Schwächen/Herausforderungen, Sicherheitsaspekten sowie Kosten katalogisiert. So kann eine Vorauswahl getroffen werden, welche Detektortypen in der weiteren Analyse betrachtet werden sollten. Im Rahmen von AP2 werden zur späteren Verwendung verschiedene Zwischen- und Endlager in Computermodellen implementiert.

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

Keine.





## **Information zu Publikationen sowie zu Aus- und Weiterbildung**

In den Halbjahresberichten werden in kurzgefasster Form die Ergebnisse der aktuell bewilligten Forschungsvorhaben dargestellt. Vorhabenrelevante Publikationen werden aufgelistet, soweit es der Platz zulässt; es ist aber nicht immer möglich, alle im Rahmen eines FuE-Vorhabens erfolgten Veröffentlichungen (schriftlich oder mündlich) aufzunehmen. Ferner sind Informationen zur Aus- und Weiterbildung wissenschaftlichen Nachwuchses bei den Forschungseinrichtungen nicht explizit abgefragt und ausgewiesen worden.

Es wurde daher beginnend mit dem Jahr 2015 vereinbart, zukünftig Angaben zur Gesamtzahl der Publikationen und zu Ausbildungsaspekten zu machen. Die entsprechenden Daten werden von den Forschungseinrichtungen zur Verfügung gestellt.

Die zusammenfassende Darstellung erfolgt im jeweils zweiten Halbjahresbericht eines Kalenderjahres. Damit soll zusätzlich zur Kurzdarstellung der Vorhabenergebnisse in den Fortschrittsberichten dokumentiert werden, dass und wie die FuE-Ergebnisse verbreitet werden.

### **Publikationen**

Im Jahr 2021 erfolgten in rund 87 Veröffentlichungen in begutachteten Journalen, in Form von Schlussberichten, Doktor-, Master-, Bachelor- und Studienarbeiten oder in sonstiger schriftlicher Form die Publikation von Ergebnissen von FuE-Vorhaben durch die geförderten Forschungseinrichtungen.

Zudem wurden im Jahr 2021 rund 98 Vorträge auf Konferenzen, bei Workshops und sonstigen Veranstaltungen gehalten und Ergebnisse bzw. Zwischenergebnisse präsentiert.

### **Aus- und Weiterbildung**

Ein strategisches Forschungsziel der 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 2021 waren in den hier aufgeführten FuE-Vorhaben 87 Nachwuchswissenschaftler in FuE-Vorhaben eingebunden.



### 3 Verzeichnis der Forschungsstellen

<b>Bundesanstalt für Materialforschung und –prüfung (BAM), Unter den Linden 87, 12205 Berlin</b>
--

- |            |  |      |
|------------|--|------|
| 02 E 11779 | MgO-Spritzbeton für Streckenverschlüsse für HAW-Endlager im Steinsalz, Qualitätssicherung mit Ultraschall (MgO-S3) | 📖 72 |
|------------|--|------|

<b>BGE TECHNOLOGY GmbH, Eschenstraße 55, 31224 Peine</b>
--

- |             |   |       |
|-------------|---|-------|
| 02 E 11577A | Verbundprojekt: Sicherheitsanalytische Untersuchungen zu Endlager-systemen im Kristallin (SUSE), Teilprojekt A  | 📖 30  |
| 02 E 11658B | Verbundprojekt: Aktualisierung der Sicherheits- und Nachweismetho-dik für die HAW-Endlagerung im Tongestein in Deutschland (AN-SICHT II), Teilprojekt B   | 📖 46  |
| 02 E 11839  | Entwicklung eines Leitfadens zur Auslegung und zum Nachweis von geotechnischen Barrieren für ein HAW Endlager in Salzformationen (RANGERS)  | 📖 88  |
| 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 | 📖 132 |
| 02 E 11900  | Langzeitsicherheit von Verschlussystemen in Schächten und Rampen im Vergleich (LARYSSA)   | 📖 136 |
| 02 E 11951B | Verbundprojekt: Kompaktion von Salzgrus für den sicheren Ein-schluss - Phase 2 (KOMPASS II), Teilprojekt B  | 📖 152 |
| 02 E 11971B | Verbundprojekt: Anwendbarkeit von Niedertemperatur-Salzschmelzen für Verschlussmaßnahmen von Endlagern für radioaktiver Abfälle im Wirtsgestein Salz (SalVE), Teilprojekt B   | 📖 162 |

<b>Christian-Albrechts-Universität zu Kiel, Christian-Albrecht-Platz 4, 24118 Kiel</b>
--

- |             |   |       |
|-------------|---|-------|
| 02 E 11849B | Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochra-dioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt B | 📖 180 |
|-------------|---|-------|

<b>Dr. Andreas Hampel, Grünberger Str. 56, 55129 Mainz</b>
--

- |             |   |      |
|-------------|---|------|
| 02 E 11446A | Verbundprojekt: Weiterentwicklung und Qualifizierung der gebirgs-mechanischen Modellierung für die HAW-Endlagerung im Steinsalz (WEIMOS), Teilprojekt A | 📖 18 |
|-------------|---|------|

<b>Forschungszentrum Jülich GmbH, Wilhelm-Johnen-Straße, 52428 Jülich</b>
---

- |             |  |       |
|-------------|--|-------|
| 02 E 11607D | Verbundprojekt: Verhalten langlebiger Spalt- und Aktivierungsprodukte im Nahfeld von Endlagern unterschiedlicher Wirtsgesteine und Möglichkeiten ihrer Rückhaltung (VESPA II), Teilprojekt D | 📖 40  |
| 02 E 11921A | Verbundprojekt: Untersuchungen zur SEParation von AMericium aus hochradioaktiven Abfalllösungen (SEPAM), Teilprojekt A   | 📖 142 |
| 02 W 6279   | Neu- und Weiterentwicklung von Konzepten, Methoden und Techniken für die internationale Kernmaterialüberwachung, insbesondere im Rahmen der nuklearen Entsorgung (SAFEGUARDS-3)              | 📖 198 |

<b>Freie Universität Berlin, Kaiserwerther Str. 16-18, 14195 Berlin</b>
---

- |             |  |       |
|-------------|--|-------|
| 02 E 11849C | Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt C | 📖 182 |
|-------------|--|-------|

<b>Friedrich-Schiller-Universität Jena, Fürstengraben 1, 07743 Jena</b>
---

- |             |   |       |
|-------------|---|-------|
| 02 E 11759A | Verbundprojekt: Grimsel Felslabor: In-situ-Experimente zur Bentonit Langzeit-Stabilität und der Radionuklidmobilität an der Grenzfläche Bentonit - Kristallin (KOLLORADO-e3), Teilprojekt A                                   | 📖 62  |
| 02 E 11850E | Verbundprojekt: Deutsch-chinesische Entsorgungsforschung – Pilotprojekt: Reanalysis of BRIUG THM Mock-up Test (ELF-China-Pilot), Teilprojekt E  | 📖 98  |
| 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 | 📖 140 |

<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Schwertnergasse 1, 50667 Köln</b>
---

- |             |  |      |
|-------------|--|------|
| 02 E 11466  | Entwicklung von Rechenmodulen für die integrierte Modellierung von Transportprozessen im einschlusswirksamen Gebirgsbereich (Re-poTREND+)  | 📖 28 |
| 02 E 11577B | Verbundprojekt: Sicherheitsanalytische Untersuchungen zu Endlager-systemen im Kristallin (SUSE), Teilprojekt B   | 📖 32 |
| 02 E 11607A | Verbundprojekt: Verhalten langlebiger Spalt- und Aktivierungsprodukte im Nahfeld von Endlagern unterschiedlicher Wirtsgesteine und Möglichkeiten ihrer Rückhaltung (VESPA II), Teilprojekt A | 📖 34 |
| 02 E 11627  | Arteigene Versatz- und Verschlussmaterialien für die Endlagerung hochradioaktiver Abfälle in Tonformationen (AVET)   | 📖 42 |
| 02 E 11658A | Verbundprojekt: Aktualisierung der Sicherheits- und Nachweismethodik für die HAW-Endlagerung im Tongestein in Deutschland (ANSICHT II), Teilprojekt A  | 📖 44 |
| 02 E 11668A | Verbundprojekt: Smart-K <sub>d</sub> in der Langzeitsicherheitsanalyse - Anwendungen (SMILE), Teilprojekt A  | 📖 48 |
| 02 E 11698  | Untersuchung thermisch-hydraulisch-mechanisch-chemischer Einwirkungen auf zementbasierte Dichte-elemente (THYMECZ)   | 📖 56 |

- 02 E 11759C Verbundprojekt: Grimsel Felslabor: In-situ-Experimente zur Bentonit Langzeit-Stabilität und der Radionuklidmobilität an der Grenzfläche Bentonit - Kristallin (KOLLORADO-e3), Teilprojekt C 66
- 02 E 11799B Verbundprojekt: Vertikales hydraulisches Dichtsystem nach dem Sandwich-Prinzip - Hauptprojekt (SANDWICH-HP), Teilprojekt B 76
- 02 E 11809A Verbundprojekt: Weiterentwicklung von d<sup>3</sup>f<sup>++</sup>: Hydrogeologische Modellierung im regionalen Maßstab (HYMNE), Teilprojekt A 80
- 02 E 11819 Mineralumwandlung und Sorption bei erhöhten Temperaturen in geklüfteten Kristallingesteinen und Barrierematerial (MUSE) 84
- 02 E 11829 Tonsteinforschung im Felslabor Mont Terri ab Phase 25 (MonTe-25) 86
- 02 E 11850B Verbundprojekt: Deutsch-chinesische Entsorgungsforschung – Pilotprojekt: Reanalysis of BRIUG THM Mock-up Test (ELF-China-Pilot), Teilprojekt B 92
- 02 E 11870A Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt A 118
- 02 E 11880 Sicherheitsrelevante Untersuchungen zur Bentonitaufsättigung (SIRUB) 130
- 02 E 11941 Wissenschaftliche Grundlagen zum Nachweis der Langzeitsicherheit von Endlagern (WiGru-9) 148
- 02 E 11951A Verbundprojekt: Kompaktion von Salzgrus für den sicheren Einschluss - Phase 2 (KOMPASS II), Teilprojekt A 150
- 02 E 11981A Verbundprojekt: Implementierung eines Monitoringsystems zur Evaluierung der Korrosionsvorgänge an Behältermaterialien in Bentonitbasierten Endlagerkonzepten (IMKORB), Teilprojekt A 164

<b>Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e.V., Bautzner Landstraße 400, 01328 Dresden</b>
--

- 02 E 11607B Verbundprojekt: Verhalten langlebiger Spalt- und Aktivierungsprodukte im Nahfeld von Endlagern unterschiedlicher Wirtsgesteine und Möglichkeiten ihrer Rückhaltung (VESPA II), Teilprojekt B 36
- 02 E 11668B Verbundprojekt: Smart-K<sub>d</sub> in der Langzeitsicherheitsanalyse - Anwendungen (SMILE), Teilprojekt B 50
- 02 E 11748B Verbundprojekt: Strömungstechnischer Funktionsnachweis für Verschlussbauwerke und flüssigkeitsgestützte Abdichtung des Kontaktbereiches - Phase III: Vertiefung Kenntnisstand Kontaktbereich & Injektionsmittel, In-situ-Versuche (STROEFUN III), Teilprojekt B 60
- 02 E 11769B Verbundprojekt: MgO-Spritzbeton für Streckenverschlüsse für HAW-Endlager im Steinsalz (MgO-S3), Teilprojekt B 70
- 02 E 11860B Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt B 104
- 02 E 11870B Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt B 120

- 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 📖 138

**Helmholtz-Zentrum für Umweltforschung GmbH – UFZ -, Permoserstr. 15, 04318 Leipzig**

- 02 E 11850A Verbundprojekt: Deutsch-chinesische Entsorgungsforschung – Pilotprojekt: Reanalysis of BRIUG THM Mock-up Test (ELF-China-Pilot), Teilprojekt A 📖 90

**IfG Institut für Gebirgsmechanik GmbH, Friederikenstr. 60, 04279 Leipzig**

- 02 E 11446B Verbundprojekt: Weiterentwicklung und Qualifizierung der gebirgsmechanischen Modellierung für die HAW-Endlagerung im Steinsalz (WEIMOS), Teilprojekt B 📖 20

- 02 E 11951C Verbundprojekt: Kompaktion von Salzgrus für den sicheren Einschluss - Phase 2 (KOMPASS II), Teilprojekt C 📖 154

**Johannes Gutenberg-Universität Mainz, Saarstraße 21, 55122 Mainz**

- 02 E 11860A Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt A 📖 102

**Johann Wolfgang Goethe-Universität Frankfurt am Main, Senckenberganlage 31, 60325 Frankfurt am Main**

- 02 E 11809B Verbundprojekt: Weiterentwicklung von d<sup>3f++</sup>: Hydrogeologische Modellierung im regionalen Maßstab (HYMNE), Teilprojekt B 📖 82

**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 📖 74

- 02 E 12001A Verbundprojekt: Sandwich Support Projekt 1: Heterogene Bentonithydratation (SANDWICH-SP1), Teilprojekt A 📖 172

**Leibniz Universität Hannover, Welfengarten 1, 30167 Hannover**

- 02 E 11446C Verbundprojekt: Weiterentwicklung und Qualifizierung der gebirgsmechanischen Modellierung für die HAW-Endlagerung im Steinsalz (WEIMOS), Teilprojekt C 📖 22

- 02 E 11849F Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt F 📖 188

- 02 E 11870E Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt E 📖 126

- 02 E 11870F Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt F 📖 128

- 02 E 11981C Verbundprojekt: Implementierung eines Monitoringsystems zur Evaluierung der Korrosionsvorgänge an Behältermaterialien in Bentonitbasierten Endlagerkonzepten (IMKORB), Teilprojekt C 📖 168

<b>Öko-Institut. Institut für angewandte Ökologie e. V., Merzhauser Str. 173, 79100 Freiburg</b>
--

- |             |  |       |
|-------------|--|-------|
| 02 E 11849G | Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt G | 📖 190 |
|-------------|--|-------|

<b>Rheinisch-Westfälische Technische Hochschule Aachen, Templergraben55, 52062 Aachen</b>
---

- |            |  |       |
|------------|--|-------|
| 02 E 11931 | Einfluss der thermischen Reife auf die gekoppelten hydro-mechanischen Eigenschaften niedrig-durchlässiger Tonsteine – Feld & Laborskala (Maturity) | 📖 146 |
| 02 W 6281  | Antineutrino-Detektion zur Überwachung radioaktiver Abfälle (NU-SAFEGUARDS)  | 📖 200 |

<b>Ruhr-Universität Bochum, Universitätsstr. 150, 44801 Bochum</b>
--

- |             |  |       |
|-------------|--|-------|
| 02 E 12001B | Verbundprojekt: Sandwich Support Projekt 1: Heterogene Bentonithydratation (SANDWICH-SP1), Teilprojekt B | 📖 174 |
|-------------|--|-------|

<b>Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Hermann-von-Helmholtz-Platz 1, 76344 Eggenstein-Leopoldshafen</b>
---

- |             |  |       |
|-------------|--|-------|
| 02 E 11607C | Verbundprojekt: Verhalten langlebiger Spalt- und Aktivierungsprodukte im Nahfeld von Endlagern unterschiedlicher Wirtsgesteine und Möglichkeiten ihrer Rückhaltung (VESPA II), Teilprojekt C | 📖 38  |
| 02 E 11668C | Verbundprojekt: Smart-K <sub>d</sub> in der Langzeitsicherheitsanalyse - Anwendungen (SMILE), Teilprojekt C  | 📖 52  |
| 02 E 11759B | Verbundprojekt: Grimsel Felslabor: In-situ-Experimente zur Bentonit Langzeit-Stabilität und der Radionuklidmobilität an der Grenzfläche Bentonit - Kristallin (KOLLORADO-e3), Teilprojekt B  | 📖 64  |
| 02 E 11849D | Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt D   | 📖 184 |
| 02 E 11849E | Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt E   | 📖 186 |
| 02 E 11860C | Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt C   | 📖 106 |
| 02 E 11850F | Verbundprojekt: Deutsch-chinesische Entsorgungsforschung – Pilotprojekt: Reanalysis of BRIUG THM Mock-up Test (ELF-China-Pilot), Teilprojekt F   | 📖 100 |
| 02 E 11921B | Verbundprojekt: Untersuchungen zur SEPARation von AMericiuM aus hochradioaktiven Abfalllösungen (SEPAM), Teilprojekt B   | 📖 144 |
| 02 E 11981B | Verbundprojekt: Implementierung eines Monitoringsystems zur Evaluierung der Korrosionsvorgänge an Behältermaterialien in Bentonit-basierten Endlagerkonzepten (IMKORB), Teilprojekt B        | 📖 166 |

<b>Technische Universität Bergakademie Freiberg, Akademiestraße 6, 09599 Freiberg</b>
---

- |             |   |     |
|-------------|---|-----|
| 02 E 11769A | Verbundprojekt: MgO-Spritzbeton für Streckenverschlüsse für HAW-Endlager im Steinsalz (MgO-S3), Teilprojekt A   | 68  |
| 02 E 11799C | Verbundprojekt: Vertikales hydraulisches Dichtsystem nach dem Sandwich-Prinzip - Hauptprojekt (SANDWICH-HP), Teilprojekt C  | 78  |
| 02 E 11850C | Verbundprojekt: Deutsch-chinesische Entsorgungsforschung – Pilotprojekt: Reanalysis of BRIUG THM Mock-up Test (ELF-China-Pilot), Teilprojekt C  | 94  |
| 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 | 134 |
| 02 E 11961  | Entwicklung eines salzgrusbasierten Versatzkonzepts unter der Option Rückholbarkeit - Phase 1 (SAVER)   | 158 |
| 02 E 11971A | Verbundprojekt: Anwendbarkeit von Niedertemperatur-Salzschmelzen für Verschlussmaßnahmen von Endlagern für radioaktiver Abfälle im Wirtsgestein Salz (SalVE), Teilprojekt A   | 160 |

<b>Technische Universität Berlin, Straße des 17. Juni 135, 10623 Berlin</b>
---

- |             |  |     |
|-------------|--|-----|
| 02 E 11849H | Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt H | 192 |
|-------------|--|-----|




<b>Technische Universität Carolo-Wilhelmina zu Braunschweig, Pockelsstr. 14, 38106 Braunschweig</b>
---

- |             |  |     |
|-------------|--|-----|
| 02 E 11446D | Verbundprojekt: Weiterentwicklung und Qualifizierung der gebirgsmechanischen Modellierung für die HAW-Endlagerung im Steinsalz (WEIMOS), Teilprojekt D | 24  |
| 02 E 11849I | Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt I                           | 194 |


<b>Technische Universität Clausthal, Adolph-Römer-Straße 2A, 38678 Clausthal-Zellerfeld</b>
---

- |             |   |     |
|-------------|---|-----|
| 02 E 11446E | Verbundprojekt: Weiterentwicklung und Qualifizierung der gebirgsmechanischen Modellierung für die HAW-Endlagerung im Steinsalz (WEIMOS), Teilprojekt E  | 26  |
| 02 E 11688  | Langzeitsicheres Abdichtungselement aus Salzschnittblöcken - Durchführung, Auswertung und Reanalyse von THM-Versuchen (Salzschnittblöcke III)   | 54  |
| 02 E 11748A | Verbundprojekt: Strömungstechnischer Funktionsnachweis für Verschlussbauwerke und flüssigkeitsgestützte Abdichtung des Kontaktbereiches - Phase III: Vertiefung Kenntnisstand Kontaktbereich & Injektionsmittel, In-situ-Versuche (STROEFUN III), Teilprojekt A | 58  |
| 02 E 11849A | Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt A  | 178 |





- 02 E 11850D Verbundprojekt: Deutsch-chinesische Entsorgungsforschung – Pilotprojekt: Reanalysis of BRIUG THM Mock-up Test (ELF-China-Pilot), Teilprojekt D  96
- 02 E 11951D Verbundprojekt: Kompaktion von Salzgrus für den sicheren Einschluss - Phase 2 (KOMPASS II), Teilprojekt D  156
- 02 E 11991 Entwicklung und Validation einer neuartigen Versuchstechnik für tri-axiale Kriechversuche bei geringer deviatorischer Belastung (KRIECHTECH)  170

**Technische Universität Dresden, Helmholtzstr. 10, 01069 Dresden**


- 02 E 11860G Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt G  114

**Technische Universität München, Arcisstraße 21, 80333 München**


- 02 E 11860E Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt E  110

- 02 E 11870D Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt D  124


**Universität des Saarlandes, Campus, 66123 Saarland**

- 02 E 11860D Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt D  108


**Universität Greifswald, Domstr. 11, 17489 Greifswald**

- 02 E 11870C Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt C  122

**Universität Heidelberg, Grabengasse 1, 69117 Heidelberg**

- 02 E 11860H Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt H  116

**Universität Kassel, Mönchebergstr. 19, 34125 Kassel**

- 02 E 11849J Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt J  196

**Universität Potsdam, Am Neuen Palais 10, 14469 Potsdam**

- 02 E 11860F Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt F  112