

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

PTE-E Nr. 68

BMUV geförderte FuE-Vorhaben zur
„Endlagerung radioaktiver Abfälle“

Berichtszeitraum: 01. Juli – 31. Dezember 2024

Projektträger Karlsruhe (PTKA)
Nukleare Sicherheitsforschung

April 2025

PTE-Berichte

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

Die Fortschrittsberichtsreihen behandeln folgende Themenschwerpunkte:

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

Die Fortschrittsberichtsreihen sind online verfügbar:

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

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

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

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

Vorwort

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

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

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

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

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

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

Der Bericht ist wie folgt gegliedert:

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

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

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

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

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

Inhaltsverzeichnis

1	Verzeichnis der Vorhaben gemäß FuE-Bereichen	1
C	Forschungsgebiet Endlagerung	1
C1	Standortauswahl	1
C2	Sicherheits- und Endlagerkonzepte; Endlagertechnik und (geo-)technische Barrieren	3
C3	Sicherheitsnachweis	8
D	Querschnittsaufgaben	13
D1	Wissens- und Kompetenzmanagement	13
D2	Sozio-technische Fragestellungen	14
D3	Kernmaterialüberwachung	16
2	Formalisierte Zwischenberichte	17
2.1	Vorhaben Bereich C1 – C3	17
2.2	Vorhaben Bereich D1 – D3	180
	Information zu Publikationen sowie zu Aus- und Weiterbildung	215
3	Verzeichnis der Forschungsstellen	216

1 Verzeichnis der Vorhaben gemäß FuE-Bereichen

C Forschungsgebiet Endlagerung

C1 Standortauswahl

02 E 11829	Tonsteinforschung im Felslabor Mont Terri ab Phase 25 (MonTe-25)	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln	 24
02 E 11931	Einfluss der thermischen Reife auf die gekoppelten hydro-mechanischen Eigenschaften niedrig-durchlässiger Tonsteine – Feld & Laborskala (Maturity)	Rheinisch-Westfälische Technische Hochschule Aachen	 71
02 E 11991	Entwicklung und Validation einer neuartigen Versuchstechnik für triaxiale Kriechversuche bei geringer deviatorischer Belastung (KRIECHTECH)	TU Clausthal, Clausthal-Zellerfeld	 82
02 E 12052A	Verbundprojekt: Konkurrenz und Reversibilität bei Sorptionsvorgängen (KuRSiv), Teilprojekt A	Helmholtz-Zentrum Dresden - Rossendorf e. V.	 103
02 E 12052B	Verbundprojekt: Konkurrenz und Reversibilität bei Sorptionsvorgängen (KuRSiv), Teilprojekt B	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH	 105
02 E 12052C	Verbundprojekt: Konkurrenz und Reversibilität bei Sorptionsvorgängen (KuRSiv), Teilprojekt C	Karlsruher Institut für Technologie (Großforschungsaufgabe), Eggenstein-Leopoldshafen	 107
02 E 12062A	Verbundprojekt: Spannungsprognosen – Quantifizierung und Reduzierung von Ungewissheiten mit geomechanisch-numerischen Untergrundmodellen (SQuaRe), Teilprojekt A: Ungewissheiten durch Materialparameter, Diskretisierung, Initial- und Randbedingungen	Technische Universität Darmstadt	 110
02 E 12062B	Verbundprojekt: Spannungsprognosen – Quantifizierung und	Helmholtz-Zentrum Potsdam Deutsches	 112

	Reduzierung von Ungewissheiten mit geomechanisch-numerischen Untergrundmodellen (SQuaRe), Teilprojekt B: Bayesischer Ansatz zur Kalibrierung geomechanisch-numerischer Modelle mit Reduzierung von Ungewissheiten	GeoForschungsZentrum GFZ	
02 E 12062C	Verbundprojekt: Spannungsprognosen – Quantifizierung und Reduzierung von Ungewissheiten mit geomechanisch-numerischen Untergrundmodellen (SQuaRe), Teilprojekt C: Ungewissheiten durch geometrische Parameter, Erstellung von Ersatzmodellen durch Methoden der künstlichen Intelligenz	Rheinisch-Westfälische Technische Hochschule Aachen	 114

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

02 E 11698	Untersuchung thermisch-hydraulisch-mechanisch-chemischer Einwirkungen auf zementbasierte Dichtelemente (THYMECZ)	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln	 20
02 E 11819	Mineralumwandlung und Sorption bei erhöhten Temperaturen in geklüfteten Kristallingesteinen und Barrierematerial (MUSE)	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln	 22
02 E 11870A	Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt A	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln	 43
02 E 11870B	Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt B	Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e. V., Dresden	 45
02 E 11870C	Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt C	Universität Greifswald	 48
02 E 11870D	Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt D	TU München	 51
02 E 11870E	Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt E	Leibniz Universität Hannover	 53
02 E 11870F	Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt F	Leibniz Universität Hannover	 55
02 E 11880	Sicherheitsrelevante Untersuchungen zur Bentonitaufsättigung (SIRUB)	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln	 57
02 E 11911A	Verbundprojekt: Vorhersage der heterogenen Radionuklidsorption auf Kluft- und Störungsflächen in granitischen Gesteinen:	Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e. V., Dresden	 63

	Parametrisierung und Validierung verbesserter reaktiver Transportmodelle (WTZ-Granit), Teilprojekt A		
02 E 11911B	Verbundprojekt: Vorhersage der heterogenen Radionuklidsorption auf Kluft- und Störungsflächen in granitischen Gesteinen: Parametrisierung und Validierung verbesserter reaktiver Transportmodelle (WTZ-Granit), Teilprojekt B	Friedrich-Schiller-Universität Jena	 65
02 E 11921A	Verbundprojekt: Untersuchungen zur SEParation von AMericiem aus hochradioaktiven Abfalllösungen (SEPAM), Teilprojekt A	Forschungszentrum Jülich GmbH	 67
02 E 11921B	Verbundprojekt: Untersuchungen zur SEParation von AMericiem aus hochradioaktiven Abfalllösungen (SEPAM), Teilprojekt B	Karlsruher Institut für Technologie (Großforschungsaufgabe), Eggenstein-Leopoldshafen	 69
02 E 12001A	Verbundprojekt: Sandwich Support Projekt 1: Heterogene Bentonithydratation (SANDWICH-SP1), Teilprojekt A	Karlsruher Institut für Technologie (Universitätsaufgabe)	 84
02 E 12001B	Verbundprojekt: Sandwich Support Projekt 1: Heterogene Bentonithydratation (SANDWICH-SP1), Teilprojekt B	Ruhr-Universität Bochum	 86
02 E 12072A	Verbundprojekt: MgO-Beton C3 als langzeitbeständiges und schnellwirksames Verschlusselement für Schachtverschlüsse zukünftiger HAW-Endlager im Salinar (MgO-C3), Teilprojekt A	Technische Universität Bergakademie Freiberg	 116
02 E 12072B	Verbundprojekt: MgO-Beton C3 als langzeitbeständiges und schnellwirksames Verschlusselement für Schachtverschlüsse zukünftiger HAW-Endlager im Salinar (MgO-C3), Teilprojekt B	Helmholtz-Zentrum Dresden - Rossendorf e. V	 118

02 E 12102	Entwicklung einer selbstlernenden Modellierungsmethodik zu geomechanischen und geotechnischen Prozessen am Beispiel der Planungs- und Auffahrungsphase einer Einlagerungsstrecke eines Tiefenlagers (SEMOTI)	Technische Universität Carolo-Wilhelmina zu Braunschweig	 122
02 E 12122A	Verbundprojekt: Stabilität von Mineralphasen des Eisens im Nahfeld eines Endlagers (STAMINA), Teilprojekt A	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH	 128
02 E 12122B	Verbundprojekt: Stabilität von Mineralphasen des Eisens im Nahfeld eines Endlagers (STAMINA), Teilprojekt B	Karlsruher Institut für Technologie (Großforschungsaufgabe) Eggenstein-Leopoldshafen	 130
02 E 12133A	Verbundprojekt: Weiterführung der Entwicklung von Ausbau von Grubenbauen für ein HAW-Endlager in Tongestein (AGEnT002), Teilprojekt A	BGE TECHNOLOGY GmbH	 132
02 E 12133B	Verbundprojekt: Weiterführung der Entwicklung von Ausbau von Grubenbauen für ein HAW-Endlager in Tongestein (AGEnT002), Teilprojekt B	DMT GmbH & Co. KG	 134
02 E 12143	Feinerkundung der Steinsalzkontur im Bereich zukünftiger Verschlussbauwerke in HAW-Endlagern durch in situ Raman-Spektroskopie (SaRa)	Technische Universität Bergakademie Freiberg	 136
02 E 12153A	Verbundprojekt: Erosion von Bentonit unter In-situ Bedingungen durch Einwirkung natürlicher Wässer in geologischen Tiefenlagern (EVIDENT), Teilprojekt A	Friedrich-Schiller-Universität Jena	 138
02 E 12153B	Verbundprojekt: Erosion von Bentonit unter In-situ Bedingungen durch Einwirkung natürlicher Wässer in geologischen Tiefenlagern (EVIDENT), Teilprojekt B	Karlsruher Institut für Technologie (Großforschungsaufgabe) Eggenstein-Leopoldshafen	 140
02 E 12153C	Verbundprojekt: Erosion von Bentonit unter In-situ Bedingungen durch Einwirkung	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH	 142

	natürlicher Wässer in geologischen Tiefenlagern (EVIDENT), Teilprojekt C		
02 E 12163A	Verbundprojekt: Vertikales hydraulisches Dichtsystem nach dem Sandwich-Prinzip - Hauptprojekt Phase 2 (Sandwich-HP2), Teilprojekt A	Karlsruher Institut für Technologie (Universitätsaufgabe)	 144
02 E 12163B	Verbundprojekt: Vertikales hydraulisches Dichtsystem nach dem Sandwich-Prinzip - Hauptprojekt Phase 2 (Sandwich-HP2), Teilprojekt B	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH	 146
02 E 12163C	Verbundprojekt: Vertikales hydraulisches Dichtsystem nach dem Sandwich-Prinzip - Hauptprojekt Phase 2 (Sandwich-HP2), Teilprojekt C	Technische Universität Bergakademie Freiberg	 148
02 E 12173	Entwicklung eines salzgrusbasierten Versatzkonzepts unter der Option Rückholbarkeit - Phase 2 (SAVER II)	Technische Universität Bergakademie Freiberg	 150
02 E 12214A	Verbundprojekt: Multi-scale experimental and numerical analysis of crushed salt material used as engineered backfill for a nuclear waste repository in rock salt (MEASURES), Teilprojekt A	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH	 158
02 E 12214B	Verbundprojekt: Multi-scale experimental and numerical analysis of crushed salt material used as engineered backfill for a nuclear waste repository in rock salt (MEASURES), Teilprojekt B	BGE TECHNOLOGY GmbH	 160
02 E 12214C	Verbundprojekt: Multi-scale experimental and numerical analysis of crushed salt material used as engineered backfill for a nuclear waste repository in rock salt (MEASURES), Teilprojekt C	IfG Institut für Gebirgsmechanik GmbH	 162
02 E 12214D	Verbundprojekt: Multi-scale experimental and numerical analysis of crushed salt material used as engineered backfill for a nuclear waste repository in rock salt (MEASURES), Teilprojekt D	Technische Universität Clausthal	 164

02 E 12234A	Verbundprojekt: Bewertung der Integrität von Endlagerbehältern unter Korrosionseinfluss im Kristallingestein (BEnKo), Teilprojekt A	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH	 174
02 E 12234B	Verbundprojekt: Bewertung der Integrität von Endlagerbehältern unter Korrosionseinfluss im Kristallingestein (BEnKo), Teilprojekt B	BGE TECHNOLOGY GmbH	 176

C3 Sicherheitsnachweis

02 E 11466	Entwicklung von Rechenmodulen für die integrierte Modellierung von Transportprozessen im einschlusswirksamen Gebirgsbereich (RepoTREND+)	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln	 18
02 E 11860A	Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt A	Johannes Gutenberg-Universität Mainz	 26
02 E 11860B	Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt B	Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e. V.	 28
02 E 11860C	Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt C	Karlsruher Institut für Technologie (Großforschungsaufgabe), Eggenstein-Leopoldshafen	 30
02 E 11860D	Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt D	Universität des Saarlandes	 32
02 E 11860E	Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt E	TU München	 35
02 E 11860F	Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt F	Universität Potsdam	 37
02 E 11860G	Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt G	TU Dresden	 39
02 E 11860H	Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt H	Universität Heidelberg	 41
02 E 11890A	Verbundprojekt: Entwicklung und Test eines erweiterten Hoek-Brown Stoffmodells zur Berücksichtigung anisotropen Festigkeitsverhaltens bei der Anwendung der	BGE Technology GmbH, Peine	 59

	Integritätskriterien für kristalline Wirtsgesteine (BARIK), Teilprojekt A		
02 E 11890B	Verbundprojekt: Entwicklung und Test eines erweiterten Hoek-Brown Stoffmodells zur Berücksichtigung anisotropen Festigkeitsverhaltens bei der Anwendung der Integritätskriterien für kristalline Wirtsgesteine (BARIK), Teilprojekt B	Technische Universität Bergakademie Freiberg	 61
02 E 11941	Wissenschaftliche Grundlagen zum Nachweis der Langzeitsicherheit von Endlagern (WiGru-9)	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH	 74
02 E 11981A	Verbundprojekt: Implementierung eines Monitoringsystems zur Evaluierung der Korrosionsvorgänge an Behältermaterialien in Bentonit-basierten Endlagerkonzepten (IMKORB), Teilprojekt A	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln	 76
02 E 11981B	Verbundprojekt: Implementierung eines Monitoringsystems zur Evaluierung der Korrosionsvorgänge an Behältermaterialien in Bentonit-basierten Endlagerkonzepten (IMKORB), Teilprojekt B	Karlsruher Institut für Technologie (Großforschungsaufgabe), Eggenstein-Leopoldshafen	 78
02 E 11981C	Verbundprojekt: Implementierung eines Monitoringsystems zur Evaluierung der Korrosionsvorgänge an Behältermaterialien in Bentonit-basierten Endlagerkonzepten (IMKORB), Teilprojekt C	Leibniz Universität Hannover	 80
02 E 12012A	Verbundprojekt: Weiterentwicklung von d ^{3f++} : Hydrogeologische Modellierung im regionalen Maßstab (HYMNE II), Teilprojekt A	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH	 88
02 E 12012B	Verbundprojekt: Weiterentwicklung von d ^{3f++} : Hydrogeologische Modellierung im regionalen Maßstab (HYMNE II), Teilprojekt B	Johann Wolfgang Goethe-Universität Frankfurt am Main	 90
02 E 12022A	Verbundprojekt: Internationales Benchmarking zur Verifizierung und Validierung von TH ² M-Simulatoren insbesondere im Hinblick auf fluiddynamische Prozesse in Endlagersystemen - Erweiterung auf multiphysikalische Ansätze und mehrdimensionale Modellgeometrien (BenVaSim II), Teilprojekt A	Technische Universität Clausthal	 93

02 E 12022B	Verbundprojekt: Internationales Benchmarking zur Verifizierung und Validierung von TH ² M-Simulatoren insbesondere im Hinblick auf fluiddynamische Prozesse in Endlagersystemen - Erweiterung auf multiphysikalische Ansätze und mehrdimensionale Modellgeometrien (BenVaSim II), Teilprojekt B	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH	 95
02 E 12032	Methoden zur experimentellen und numerischen Analyse der geologischen Barriere eines Endlagers in tonreichen Sedimentgesteinsformationen (MAGNUS)	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH	 97
02 E 12042A	Verbundprojekt: Erarbeitung einer Methodik zur systematischen Ableitung von zu erwartenden und abweichenden Entwicklungen im Kristallingestein in Deutschland und exemplarische Anwendung als Grundlage zur Bewertung des sicheren Einschlusses unter Berücksichtigung von Optimierungsmaßnahmen (CHRISTA III), Teilpr. A	BGE TECHNOLOGY GmbH	 99
02 E 12042B	Verbundprojekt: Erarbeitung einer Methodik zur systematischen Ableitung von zu erwartenden und abweichenden Entwicklungen im Kristallingestein in Deutschland und exemplarische Anwendung als Grundlage zur Bewertung des sicheren Einschlusses unter Berücksichtigung von Optimierungsmaßnahmen (CHRISTA III), Teilpr. B	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH	 101
02 E 12082	Langzeitsicheres Abdichtungselement aus Salzschnittblöcken - Durchführung, Auswertung und Reanalyse von THM-Versuchen unter triaxialer Extensionsbeanspruchung (SSBVIER)	Technische Universität Clausthal	 120
02 E 12112A	Verbundprojekt: Systematic sensitivity analysis for mechanistic geochemical models using field data from crystalline rock (SANGUR), Teilprojekt A	Helmholtz-Zentrum Dresden - Rossendorf e. V.	 124

02 E 12112B	Verbundprojekt: Systematic sensitivity analysis for mechanistic geochemical models using field data from crystalline rock (SANGUR), Teilprojekt B	Technische Universität Clausthal	 126
02 E 12184	Flankierende nationale und internationale Vernetzung für Forschung und Kompetenzerhalt im Bereich Endlagersicherheit (FLANKE)	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH	 153
02 E 12194	Interaktionen zwischen den geotechnischen Barrieren eines Endlagers in tonreichen Sedimentgesteinsformationen - Phase 1 (INTERESE)	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH	 156
02 E 12224A	Verbundprojekt: Rückhaltung und Löslichkeit dosisrelevanter Radionuklide unter den reduzierenden Nahfeldbedingungen eines Endlagers im Ton- oder Kristallingestein (RULET), Teilprojekt A	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH	 166
02 E 12224B	Verbundprojekt: Rückhaltung und Löslichkeit dosisrelevanter Radionuklide unter den reduzierenden Nahfeldbedingungen eines Endlagers im Ton- oder Kristallingestein (RULET), Teilprojekt B	Helmholtz-Zentrum Dresden - Rossendorf e. V.	 168
02 E 12224C	Verbundprojekt: Rückhaltung und Löslichkeit dosisrelevanter Radionuklide unter den reduzierenden Nahfeldbedingungen eines Endlagers im Ton- oder Kristallingestein (RULET), Teilprojekt C	Karlsruher Institut für Technologie (Großforschungsaufgabe) Eggenstein-Leopoldshafen	 170
02 E 12224D	Verbundprojekt: Rückhaltung und Löslichkeit dosisrelevanter Radionuklide unter den reduzierenden Nahfeldbedingungen eines Endlagers im Ton- oder Kristallingestein (RULET), Teilprojekt D	Forschungszentrum Jülich GmbH	 172
02 E 12254	Methodisches Vorgehen zur Entwicklung und Validierung von Modellen zur langzeitsicherheitsbewerten Bewertung von Endlagern für radioaktive Abfälle (DOSIS)	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH	 178

D Querschnittsaufgaben

D1 Wissens- und Kompetenzmanagement

D2 Sozio-technische Fragestellungen

02 E 11849A	Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt A	TU Clausthal, Clausthal- Zellerfeld	 181
02 E 11849B	Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt B	Christian-Albrechts- Universität zu Kiel	 185
02 E 11849C	Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt C	Freie Universität Berlin	 188
02 E 11849D	Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt D	Karlsruher Institut für Technologie (Großforschungsaufgabe), Eggenstein- Leopoldshafen	 190
02 E 11849E	Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt E	Karlsruher Institut für Technologie (Großforschungsaufgabe), Eggenstein- Leopoldshafen	 192
02 E 11849F	Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt F	Leibniz Universität Hannover	 196
02 E 11849G	Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt G	Öko-Institut. Institut für angewandte Ökologie e. V.	 200
02 E 11849H	Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt H	TU Berlin	 202
02 E 11849I	Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver	TU Carolo-Wilhelmina zu Braunschweig	 204

	Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt I		
02 E 11849J	Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt J	Universität Kassel	 206
02 E 12204	Formen der Konfliktbearbeitung in der nuklearen Entsorgung (KonE)	Karlsruher Institut für Technologie (Großforschungsaufgabe) Eggenstein- Leopoldshafen	 208

D3 Kernmaterialüberwachung

02 W 6279	Neu- und Weiterentwicklung von Konzepten, Methoden und Techniken für die internationale Kernmaterialüberwachung, insbesondere im Rahmen der nuklearen Entsorgung (SAFEGUARDS-3)	Forschungszentrum Jülich	 210
02 W 6281	Antineutrino-Detektion zur Überwachung radioaktiver Abfälle (NU-SAFEGUARDS)	Rheinisch-Westfälische Technische Hochschule Aachen	 212

2 Formalisierte Zwischenberichte

2.1 Vorhaben Bereich C1 – C3

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 11466
Vorhabensbezeichnung: RepoTREND+: Entwicklung von Rechenmodulen für die integrierte Modellierung von Transportprozessen im einschlusswirksamen Gebirgsbereich		
Zuordnung zum FuE-Förderprogramm: C3.3 Werkzeuge der Sicherheitsanalysen		
Laufzeit des Vorhabens: 01.04.2016 bis 31.10.2024	Berichtszeitraum: 01.07.2024 bis 31.10.2024	
Gesamtkosten des Vorhabens: 3.466.655,00 EUR	Projektleiter: Reiche, Tatiana	

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

Das Arbeitsprogramm gliedert sich in sechs Arbeitspakete:

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

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

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

Arbeitspaket 4: Test, Qualitätssicherung, Dokumentation. Umfangreiche Tests werden in allen Programmentwicklungsphasen durchgeführt. Die folgenden QS-Maßnahmen werden umgesetzt: Standardisierung der Arbeitsprozesse, Versions- und Konfigurationsmanagement, Release-Freigabe, Bugtracking, Lokalisierung von Problemen, Programmkommentare, Konventionen, Review des Programmcodes. Die gesamte Entwicklung über alle Phasen wird ausführlich dokumentiert.

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

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

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Arbeitspaket 1

Zur Vertiefung des Wissens auf dem Gebiet der Strömungs- und Transportprozesse in porösen Medien wurde an der internationalen Konferenz CMWR 2024 vom 30.09. bis 3.10. (in Tucson, USA) teilgenommen. Auf der Konferenz wurde der aktuelle Stand von RepoTREND vorgestellt.

Arbeitspaket 4

Die Wiederholbarkeit des Laborversuchs zur Untersuchung von Transportprozessen in porösen Medien, der zur Validierung von NaTREND konzipiert wurde, wurde im Rahmen einer Versuchsreihe geprüft. Für die anschließende Datenauswertung wurde der Einsatz von maschinellem Lernen erfolgreich getestet.

Es wurden weitere Testrechnungen zum Radionuklidtransport konzipiert und durchgeführt.

Arbeitspaket 6

Der vorliegende Bericht wurde erstellt. Der Abschlussbericht wurde fertiggestellt.

4. Geplante weitere Arbeiten

-

5. Berichte, Veröffentlichungen

Reiche, T., Becker, D.-A., Lauke, Th., Wolf, J.: *RepoTREND: Program Package for Safety Analysis of a Final Repository for Radioactive Waste*, CMWR 2024, 30.Sep.-3. Okt., 2024, Tucson (USA).

Reiche, T. et al.: *Simulation von Nahfeldprozessen in einem Endlager für radioaktive Abfälle*, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, GRS-742, Braunschweig, (im Druck).

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 11698
Vorhabensbezeichnung: Untersuchung thermisch-hydraulisch-mechanisch-chemischer Einwirkungen auf zementbasierte Dichtelemente (THyMeCZ)		
Zuordnung zum FuE-Programm: C3.1 Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-) Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung		
Laufzeit des Vorhabens: 01.09.2018 bis 31.12.2024	Berichtszeitraum: 01.07.2024 bis 31.12.2024	
Gesamtkosten des Vorhabens: 2.643.476,42 EUR	Projektleiter: Dr. Thorsten Meyer	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

3. Durchgeführte Arbeiten

AP 1 – Bereitstellung von Material und Methoden

Der von der GRS in Zusammenarbeit mit dem Arbeitskreis Betonkorrosion (AKB) vorbereitete Workshop „Zementbasierte Verschlussbauwerke im Salinar“ wurde erfolgreich durchgeführt; der Tagungsband hierzu liegt nun zum download bereit (GRS-765).

AP 2 – HC-Versuche

Die im AP 2 vorgesehenen Versuche wurden bereits erfolgreich abgeschlossen.

AP 3 – HMC-Versuche

Die im AP 3 vorgesehenen Versuche wurden bereits erfolgreich abgeschlossen.

AP 4 – THC-Versuche

Die im AP 4 vorgesehenen Versuche wurden bereits erfolgreich abgeschlossen.

AP 5 – TM-Versuche

Die im AP 5 vorgesehenen Versuche wurden bereits erfolgreich abgeschlossen.

AP 6 – THMC-Versuche

Die im AP 6 vorgesehenen Versuche wurden bereits erfolgreich abgeschlossen.

AP 7 – Modelltheoretische Untersuchungen

Die im AP 7 vorgesehenen Modellrechnungen wurden erfolgreich abgeschlossen.

AP 8 – Dokumentation

Es erfolgt die Erstellung des Abschlussberichtes.

AP 9 – Untersuchung der Salzkörper aus der WIPP

Erste hydraulisch-mechanische Untersuchungen zum verwendeten US-Beton wurden bereits durchgeführt. Aufgrund der hohen Durchlässigkeiten müssen die kombinierten Prüfkörper zunächst kompaktiert werden, bevor sie durchströmt werden können.

AP 10 – Langzeitkorrosionsversuche

Die im AP 10 vorgesehenen Versuche zur Langzeitkorrosion wurden erfolgreich abgeschlossen.

AP 11 – MAGIC

Das EU-Projekt MAGIC wurde abgeschlossen.

4. Geplante Weiterarbeiten

-

5. Berichte, Veröffentlichungen

-

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 11819	
Vorhabensbezeichnung: <u>M</u> ineralumwandlung <u>u</u> nd <u>S</u> orption bei <u>e</u> rhöhten Temperaturen in geklüfteten Kristallingesteinen und Barrierematerial (MUSE)			
Zuordnung zum FuE-Programm: FuE-Feld C2.3 Geotechnische und technische Barrieren, Punkt 2, 4 FuE-Feld C3.1 Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-)Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung, Punkt 1			
Laufzeit des Vorhabens: 01.08.2019 bis 31.08.2024		Berichtszeitraum: 01.07.2024 bis 31.08.2024	
Gesamtkosten des Vorhabens: 1.930.070,84 EUR		Projektleiterin: Dr. Artur Meleshyn	

1. Vorhabenziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

Bei der Durchführung des Vorhabens werden folgende Arbeitspakete bearbeitet:

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

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

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

AP 4: Dokumentation und Projektleitung

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP 1: Übertragbarkeit der normierten Verteilungskoeffizienten:

Keine Arbeiten durchgeführt.

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

Keine Arbeiten durchgeführt.

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

Keine Arbeiten durchgeführt.

AP 4: Dokumentation und Projektleitung:

Die Vorbereitung des Abschlussberichtes wurde fortgesetzt.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP 1: Keine weiteren Arbeiten.

AP 2: Keine weiteren Arbeiten.

AP 3: Keine weiteren Arbeiten.

AP 4: Fertigstellung des Abschlussberichtes.

5. Berichte, Veröffentlichungen

- keine -

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 11829
Vorhabensbezeichnung: Tonforschung im Felslabor Mont Terri ab Phase 25 (MonTe-25)		
Zuordnung zum FuE-Programm: C2.2 Endlagertechnik C3.1 Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-) Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung		
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2019 bis 31.12.2025	Berichtszeitraum: 01.07.2024 bis 31.12.2024	
Gesamtkosten des Vorhabens: 2.334.940,00 EUR	Projektleiter: Dr.-Ing. Oliver Czaikowski	

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

- AP1: FE Experiment – Porendruckmessungen und Modellrechnungen als Beitrag zum Streckenlagerungsexperiment der NAGRA im 1:1 Maßstab
- AP2: HE-E Experiment – Weiterführung des im Rahmen des EU-Projekts PEBS aufgebauten Erhitzerversuchs im Mikrotunnel (mit NAGRA, ENRESA, BGR, Obayashi)
- AP3: DM-A Experiment – Langzeitverformungsmessung des Tonsteins in einem Bohrloch
- AP4/5/6: Keine Fortführung der Arbeiten
- 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: Im Berichtszeitraum ist das Monitoring der Porendrücke sowie der Gebirgstemperaturen planmäßig fortgesetzt worden. Die Daten im Bereich des Verschlusses zeigen keine Veränderung des erreichten Niveaus, während die Daten am Tunnelende zeigen, dass sich das von den Erhitzern erzeugte Temperaturfeld weiter axial in das Gebirge hin ausbreitet.

AP2: Im Berichtszeitraum haben keine Aktivitäten stattgefunden. Das jährliche Treffen, das ursprünglich für den Herbst vorgesehen war, wurde auf den 22. Januar 2025 verschoben. Hier soll dann der aktuelle Stand der Messungen vorgestellt und auf dieser Grundlage über das weitere Vorgehen (Abschaltung vs. Temperaturerhöhung vs. keine zusätzliche Einflussnahme auf das laufende Energieniveau) erfolgen. Eine weitere Probenahme wurde bis auf weiteres ausgesetzt.

AP3: Die Messungen wurden auch im Berichtszeitraum fortgeführt. Bei der Datenaufbereitung musste leider festgestellt werden, dass eine kontinuierliche Datenaufnahme mit der verwendeten Technik nicht gewährleistet werden kann. In der ersten Jahreshälfte 2025 sind daher unbedingt Vorkehrungen zu treffen, um die Datenaufnahme über ein vorhandenes kabelgebundenes Messwerterfassungssystem sicherzustellen. Mit dem Betreiber des Untertagelabors Swisstopo werden dazu bereits erste Gespräche geführt.

AP9: Im 1. HJB 2025 wurde davon berichtet, dass bei dem Anschluss der elektrischen Druckaufnehmer der neu installierten Minipiezometer an die Datenaufnahme Schwierigkeiten aufgetreten sind. Im Berichtszeitraum konnte eine kontinuierlich Datenaufnahme beginnend im September 2025 sichergestellt werden. Die Daten, die mit Inbetriebnahme im März des Jahres gemessen wurden, sind laut Auskunft der vom Betreiber des Untertagelabors beauftragten Firma Six Sense verfügbar. Im Berichtszeitraum konnten diese Daten trotz mehrfacher Rücksprache mit Swisstopo nicht dem CD-A Konsortium zur Verfügung gestellt werden. Nach Fertigstellung von MONTEIS sollen diese Daten in das vom Mont Terri Konsortium entwickelte System übernommen werden.

AP10: Teilnahme an den SM-95 am 19.09.2024 und am SM-96 am 13.11.2024.

4. Geplante Weiterarbeiten

Fortführung der Porendruck- und Temperaturmessungen, Identifizierung aussagekräftiger Messsensoren für zur Vorbereitung des Arbeitsplans für die kommende Phase 30, Teilnahme an Steering Meetings und VK zu den einzelnen APs.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine

Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer: Johannes Gutenberg-Universität Mainz, Saarstr. 21, 55122 Mainz		Förderkennzeichen: 02 E 11860A
Vorhabensbezeichnung: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen – Phase II (GRaZ II), Teilprojekt A		
Zuordnung zum FuE-Programm: C2.3 Geotechnische und technische Barrieren C3.1 Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-) Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2020 bis 31.12.2024	Berichtszeitraum: 01.07.2024 bis 31.12.2024	
Gesamtkosten des Vorhabens: 735.947,00 EUR	Projektleiter: Prof. Reich	

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

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

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Um den Einfluss von Gluconat (GLU) auf die Rückhaltung von $^{239}\text{Pu(IV)}$ an CSH-Phasen mit C:S = 1,65 zu untersuchen, wurden weitere Batchexperimente unter Ar-Atmosphäre durchgeführt. Die Experimente wurden mit CSH-Suspensionen (S/L = 5 g/L) unter Verwendung von 10^{-8} M $^{239}\text{Pu(IV)}$ und zwei unterschiedlichen GLU-Konzentrationen (10^{-5} M und 10^{-2} M GLU) in Mutterlaugenlösung (pH 12,4) durchgeführt. Diese Lösung, die aus der CSH-Herstellung stammt, wurde 14 Tage lang mit den jeweiligen CSH-Phasen equilibriert und anschließend zentrifugiert. Die Reihenfolge der Zugaben wurde bei den Experimenten folgendermaßen variiert: (i) zuerst Pu, anschließend GLU; (ii) zuerst GLU, anschließend Pu; und (iii) gleichzeitige Zugabe von Pu und GLU. Zwischen den jeweiligen Zugaben lag ein Zeitraum von 72 Stunden.

Die erhaltenen Ergebnisse zeigen, dass bei beiden GLU-Konzentrationen die Reihenfolge der Zugabe keinen Einfluss auf die Sorption von GLU an der CSH-Phase (25% bei 10^{-5} M GLU und 37% bei 10^{-2} M GLU) hat. Die Sorption von Pu an der CSH-Phase fällt geringer aus (91%), wenn zuvor GLU in einer Konzentration von 10^{-2} M zugegeben wurde oder bei einer gleichzeitigen Zugabe. Bei einer GLU-Konzentration von 10^{-5} M ist hingegen kein Einfluss auf die Sorption (99%) des Plutoniums erkennbar. Bei früheren Experimenten bei höherer Ionenstärke (VGL-C) und 10^{-2} M GLU wurde ein deutlicherer Einfluss der Variationen der Zugabe auf die Pu-Rückhaltung an CSH-Phasen (C:S = 1,65) festgestellt (s. vorherigen Bericht).

Die vorläufige Auswertung der EXAFS-Messungen, die im September 2024 an der Rossendorf Beamline (ESRF) zur Untersuchung der Wechselwirkungen von Am(III), Th(IV), Pu(IV), Np(V) und U(VI) mit CSH-Phasen (C:S = 0,8) durchgeführt wurden, zeigt, dass die bestimmten strukturellen Parameter der Pu-Proben – d. h. interatomare Abstände und Koordinationszahlen der O-, Si- und Ca-Koordinationschalen ($8 \times \text{Pu-O}$ bei 2,3 Å, $3 \times \text{Pu-Si}_1$ bei 3,1 Å, $4 \times \text{Pu-Si}_2$ bei 3,6 Å und $6 \times \text{Pu-Ca}$ bei 4,2 Å) – sowohl bei Sorptions- als auch bei Inkorporationsproben (1 Tag bzw. 4 Wochen Kontaktzeit) den quantenchemischen Berechnungen aus der Literatur ähnlich sind und auf einen zügigen Einbau von Pu(IV) in die CSH-Phasen hinweisen.

Zur Bestätigung und Datenabsicherung der in einem früheren Experiment beobachteten starken Zunahme der Pu-Mobilität in Anwesenheit von Isosaccharinsäure (ISA) wurde ein neues Experiment zur Diffusion von Pu(IV) in Zementstein (HCP) in Gegenwart von 10^{-2} M ISA begonnen. Dabei wurden ACW-Z (Zementporenwasser mit HCP equilibriert, pH > 12) mit niedriger Ionenstärke und VGL-Z (verdünnte Gipshuttlösung mit HCP equilibriert, pH 12,4) mit höherer Ionenstärke als mobile Phasen verwendet. Zunächst wurde in filterfreien Diffusionszellen unter Ar-Atmosphäre die Porosität der vorbereiteten HCP-Kerne mittels HTO-Durchdiffusion überprüft. Die Charakterisierung des Zementkerns in beiden Elektrolyten mittels HTO wurde nach 30 Tagen erfolgreich beendet. Die erhaltenen Diffusionsparameter ($D_e = (1,71 \pm 0,03) \times 10^{-11}$ m²/s, $\alpha = (0,78 \pm 0,01)$) in ACW-Z sowie in VGL-Z ($D_e = (9,7 \pm 0,3) \times 10^{-12}$ m²/s, $\alpha = (0,65 \pm 0,02)$) stimmen gut mit früheren Messungen (s. vorherige Berichte) überein. Nach ca. 60 Tagen HTO-Ausdiffusion konnte im Oktober 2024 die Eindiffusion von $1,0 \times 10^{-9}$ M $^{238}\text{Pu(IV)}$ in die HCP-Kerne gestartet werden. Diese Diffusionsversuche können erst im Februar 2025 beendet und das Pu-Diffusionsprofil mittels der abrasiven Schleifmethode bestimmt werden.

4. Geplante Weiterarbeiten

Abschluss der Auswertung der EXAFS- und Diffusionsexperimente sowie Erstellung des Abschlussberichts.

5. Berichte, Veröffentlichungen

M. Matejcek, Untersuchung der Diffusion von Plutonium in Zementstein und Analyse mittels TOF-SIMS und Laser-SNMS, 2024, (Masterarbeit).

Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer: Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e. V., Bautzner Landstr. 400, 01328 Dresden		Förderkennzeichen: 02 E 11860B
Vorhabensbeschreibung: Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen (GRaZ II), Teilprojekt B		
Zuordnung zum FuE-Förderprogramm: C2.3 Geotechnische und technische Barrieren C3.1 Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-) Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2020 bis 31.12.2024	Berichtszeitraum: 01.07.2024 bis 31.12.2024	
Gesamtkosten des Vorhabens: 719.658,00 EUR	Projektleiter: Dr. Katja Schmeide	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- Die systematischen Untersuchungen zur U(VI)–Citrat-Komplexierung im pH-Bereich 9 bis 13 wurden weitergeführt. Dazu wurden nun CE-ICP-MS-Messungen bei pH-Werten > 9 in Kooperation mit der Johannes Gutenberg-Universität Mainz durchgeführt. Die Zugabe von Ca^{2+} -Ionen erhöht die elektrophoretische Mobilität der U(VI)–Citrat-Komplexe. Um den Effekt weiter zu untersuchen wurden ^1H NMR- und TRLFS-Messungen durchgeführt. Diese zeigen, dass sich in Gegenwart von Ca^{2+} -Ionen andere Spezies bilden als in deren Abwesenheit. Offenbar bilden sich heterobimetallische Calcium Uranyl Citrat Komplexe. Mithilfe abschließender ^{43}Ca -NMR-Messungen soll diese Hypothese überprüft werden.
- 2 Manuskripte wurden fertiggestellt und zur Veröffentlichung in internationalen Zeitschriften mit Peer-Review eingereicht (siehe Abschnitt 5: Schmeide et al., Zenker et al.).

4. Geplante Weiterarbeiten

- Weitere Veröffentlichung von Forschungsergebnissen in internationalen Zeitschriften mit Peer-Review:
 - U(VI)-Komplexierung durch Citrat bei pH 9-13
 - Einfluss von Organika auf die U(VI)-Rückhaltung an C-A-S-H-Phasen
 - Einfluss von NTA auf die Eu(III)-Rückhaltung an C-A-S-H-Phasen
- Erstellung des Abschlussberichtes bis 30.06.2025

5. Berichte, Veröffentlichungen

Schmeide, K., Huittinen, N.M., Shams Aldin Azzam, S., Brendler, E., Lothenbach, B., Kretzschmar, J.: Uranium(VI) retention by calcium aluminosilicate hydrates – Impact of temperature and ionic strength. Appl. Geochem. (unter Review).

Zenker, S., Lohmann, J., Chiorescu, I., Krüger, S., Kumke, M., Reich, T., Schmeide, K., Kretzschmar, J.: Complexation of Ln(III) ions by gluconate: Joint investigation applying TRLFS, CE-ICP-MS, NMR, and DF calculations. Inorg. Chem. (unter Review).

Sieber, C., Kretzschmar, J., Drobot, B., Goldbach, D., Schmeide, K., Stumpf, T.: Effect of citrate on aqueous U(VI) speciation and U(VI) retention on Ca-bentonite. ATAS - AnXAS 2024 - Joint Workshop. 07.-11.10.2024, Karlsruhe, Germany. (Vortrag)

Sieber, C., Kretzschmar, J., Drobot, B., Schmeide, K., Stumpf, T.: Effect of citrate on aqueous U(VI) speciation and U(VI) retention on Ca-bentonite. 10th International Conference on Nuclear and Radiochemistry, 25.-30.08.2024, Brighton, United Kingdom. (Poster)

Schmeide, K., Philipp, T., Sieber, C., Huittinen, N.: Mutual effects of pH, matrix elements and organic ligands on the mobility of U(VI) in bentonite systems. International Conference on Clays in Natural and Engineered Barriers for Radioactive Waste Confinement, 25.-28.11.2024, Hannover, Germany. (Poster)

Auftragnehmer: Karlsruher Institut für Technologie (Großforschungsaufgabe)	Förderkennzeichen: 02 E 11860C
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen – Phase II, (GRaZ II), Teilprojekt C	
Zuordnung zum FuE-Programm: C2.3 Geotechnische und technische Barrieren C3.1 Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-) Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung	
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2020 bis 31.12.2024	Berichtszeitraum: 01.07.2024 bis 31.12.2024
Gesamtkosten des Vorhabens: 539.828,50 EUR	Projektleiter: Dr. Marcus Altmaier

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

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

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

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

AP 3: Nachwuchsförderung im Bereich der nuklearen Entsorgung.

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

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP 1: (i) Veröffentlichung der Batch- und TRLFS-Ergebnisse zur Sorption von Eu(III) und Cm(III) an CSH-Phasen in NaCl- und CaCl₂-haltigen Lösungen in Anwesenheit von EDTA: (ii) Finalisierung der Auswertung der EXAFS-Experimente der strukturellen Untersuchung der ternären Ca-Am(III)-EDTA Komplexe.

AP 2: Beginn der Erstellung des Abschlussberichts.

AP 3: Es wurden hierzu von KIT-INE keine Aktivitäten in dieser Projektphase durchgeführt.

AP 4: Es wurden hierzu von KIT-INE keine Aktivitäten in dieser Projektphase durchgeführt.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP 1: Erstellung des Abschlussberichtes

AP 2: Erstellung des Abschlussberichtes

AP 3: Es sind hierzu von KIT-INE keine Aktivitäten in der kommenden Projektphase geplant.

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

5. Berichte, Veröffentlichungen

Thumm et al. (2024), Uptake of Cm(III) and Eu(III) by C-S-H phases under saline conditions in presence of EDTA: A batch sorption and TRLFS study, Applied Geochemistry 170, 106087, <https://doi.org/10.1016/j.apgeochem.2024.106087>.

Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer: Universität des Saarlandes, Anorganische Festkörperchemie Postfach 15 11 50, 66041 Saarbrücken		Förderkennzeichen: 02 E 11860D
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt D		
Zuordnung zum FuE-Programm: C2.3 Geotechnische und technische Barrieren C3.1 Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-) Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung		
Laufzeit des Vorhabens: 01.01.2021 bis 30.06.2025	Berichtszeitraum: 01.07.2024 bis 31.12.2024	
Gesamtkosten des Vorhabens: 656.091,50 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Ralf Kautenburger	

1. Vorhabensziele/Bezug zu den anderen Vorhaben

Das Verbundprojekt GRaZ II befasst sich mit der Rückhaltung von Radionukliden an Zementalterationsphasen und Bentonit unter geochemischen Bedingungen (mittlere Ionenstärken im alkalinen Bereich von pH 11-13), die für die Tonformationen in Norddeutschland relevant sind (Standortmodell NORD). Hierbei werden schwerpunktmäßig solche Parameter untersucht, die die geochemische Radionuklidrückhaltung an Zement und Zementalterationsphasen auch in Anwesenheit von Fe(II)/Fe(III) beeinflussen. Es werden sowohl Immobilisierungs- als auch Remobilisierungsprozesse in Betracht gezogen. Im Teilprojekt der Universität des Saarlandes wird das Retentionsverhalten der Elemente des Waste-Cocktails (Zr(IV), Mo(VI), Ru(III), Pd(II), Cs(I), Sm(III), Eu(III), U(VI)) einzeln und im Gemisch an Zement und Zementalterationsphasen, wie Calcium-Silikat-Hydratphasen (C-S-H), sowie an Tonmineralien, wie beispielsweise Ca-Bentonit, untersucht. Dabei soll auch der Einfluss von Fe(II) berücksichtigt werden. Weiterhin wird der Einfluss des Zementadditivs PBTC (2-Phosphono-butan-1,2,4-tricarbonsäure) auf das Retentionsverhalten der Elemente des Waste-Cocktails von C-S-H-Phasen auf weitere Adsorbensmaterialien, wie beispielsweise Ca-Bentonit, ausgeweitet. Die Experimente werden als stationäre Batch-Experimente oder als dynamische Minisäulenexperimente (MSE) durchgeführt. Zur Untersuchung von festen Proben soll im Projekt die Kopplung einer Laserablation mit ICP-MS implementiert werden, um zusätzlich zu den Sorptionsdaten aus Batch-Experimenten eine orts aufgelöste Untersuchung der Adsorbensmaterialien, wie beispielsweise zur Bestimmung des genauen C:S-Verhältnis der C-S-H-Phasen oder Adsorptionsbereichen an Festphasen der MSE, durchführen zu können.

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 an Festphasen unter dem Einfluss von Zementzusätzen unter hochsalinaren und hyperalkalinen Bedingungen
- AP3: Untersuchungen zur Fixierung und Remobilisierung der Waste-Cocktail-Elemente aus dotierten Festphasen
- AP4: Untersuchung zur Remobilisierungskinetik eingebauter Radionuklide aus dotierten Festphasen durch Konkurrenzreaktionen

AP5: Zeitabhängige Retention des Waste-Cocktails an Festphasen im Batch und vergleichend in MSE sowie Implementierung einer LA-ICP-MS-Kopplung zur Untersuchung der Elementverteilung in den Festphasen

AP6: Nachwuchsförderung und Kompetenzerhalt auf dem Gebiet der Geochemie und Radionuklidrückhaltung

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im Untersuchungszeitraum wurde der Rückhalt der Waste-Cocktail (WC) Elemente Zr(IV), Mo(VI), Ru(III), Pd(II), Cs(I), Sm(III), Eu(III) und U(VI) ($c = 500 \text{ nM}$) bei unterschiedlichen Zugabezeitpunkten von $50 \mu\text{M Fe(II)}$ an kommerziell erhältlichen C-S-H-Phasen (Circosil®; C/S = 0,83) untersucht. Dabei wurde in Batchexperimenten Fe(II) entweder mit den WC-Elementen oder erst nach 7 d zur C-S-H-Elektrolytlösung gegeben. Ziel war es, den Einfluss von Eisen auf Adsorptions- und Fällungsgleichgewichte sowohl für die Einzelelemente (EE) als auch im WC nachzuvollziehen. Als Hintergrundelektrolyten fungierten $0,1 \text{ M NaCl}$ und Verdünnte Gipshut-Lösung (VGL), wobei sich ein pH-Wert in Kontakt mit Circosil® im Gleichgewicht von $10,0 \pm 0,2$ (NaCl) bzw. $9,7 \pm 0,2$ (VGL) einstellte. Mo(VI) blieb durchgehend vollständig in Lösung. Für Zr(IV), Ru(III), Sm(III), Eu(III) und U(VI) wurde bei sämtlichen Versuchsbedingungen eine Retention von $>94\%$ gemessen, unabhängig vom Zugabezeitpunkt des Eisens. Für Sm(III), Eu(III) und U(VI) wurde ein verstärkter Rückhalt verglichen mit eisenfreien Systemen beobachtet. Dabei könnte eine Co-Fällung mit Eisenhydroxiden bei sich ausbildenden bzw. bestehenden Gleichgewichten vorliegen. Bei Pd(II) führte die spätere Zugabe von Fe(II) in NaCl zu einem bis zu 5% höheren und in VGL zu einem bis zu 22% höheren Rückhalt, wobei auch hier eine Co-Fällung vermutet wird. Bei Cs(I) führte die Zugabe von Fe(II), unabhängig vom Zugabezeitpunkt, vor allem in $0,1 \text{ M NaCl}$, zu einer deutlich verringerten Retention ($<40\%$ vs. $>70\%$). Mechanistisch könnte dem eine Konkurrenz beider Ionen um ähnliche Adsorptionsstellen an den C-S-H-Phasen zugrunde liegen. Bei den untersuchten Bedingungen hat Fe(II) nur einen geringen disruptiven Einfluss auf bestehende Gleichgewichte in Lösung und führt einzig bei Cs(I) zu einem verstärkten Verbleiben in Lösung.

Weiterhin wurde die Remobilisierung von Si(VI), Ca(II), Mo(VI), Eu(III) und U(VI) aus, mit Mo(VI), Eu(III) und U(VI), dotierten C-S-H-Phasen (C/S = 1,07) in Abhängigkeit der Ionenstärke ($0,1 \text{ M}$, 1 M und 2 M NaCl) mittels Minisäulen-Experimenten (MSE) untersucht. Für Si(IV) und Ca(II) konnte hier mit steigender Ionenstärke auch ein höheres Leaching beobachtet werden. Wird die Ionenstärke weiter erhöht (2 M NaCl), ist dieser Effekt rückläufig. Für die dotierten Analyten lässt sich nur für U(VI) ein geringer Einfluss der Ionenstärke erkennen, wobei zudem auf zwei unterschiedliche Rückhaltmechanismen geschlossen werden kann. Hier ist ein Anstieg der Remobilisierung von $0,06\%$ ($0,1 \text{ M NaCl}$) auf bis zu $0,44\%$ (2 M NaCl) zu beobachten. Für Eu(III) bleibt der Rückhalt unabhängig der Ionenstärke annähernd quantitativ und für Mo(VI) ist liegt die Remobilisierung, ebenfalls unabhängig der Ionenstärke, bei 80 bis 90%.

Zusätzlich wurde der Einfluss von PBTC auf das Leaching der oben genannten dotierten C-S-H-Phasen untersucht. Dabei wurde PBTC im 500-fachen Überschuss (bezogen auf Eu(III)), verteilt auf 100 Injektionen, auf die Säule gebracht. Dabei konnte ein Einfluss auf die Remobilisierung von Si(IV), Ca(II), Mo(VI) und Eu(III) beobachtet werden (in H_2O : $9\% \text{ Si(IV)} / 15\% \text{ Ca(II)} / 69\% \text{ Mo(VI)} / 0,1\% \text{ Eu(III)}$; in Anwesenheit von PBTC: $14\% \text{ Si(IV)} / 20\% \text{ Ca(II)} / 73\% \text{ Mo(VI)} / 0,9\% \text{ Eu(III)}$). In diesem Kontext deutet das Remobilisierungsverhalten von Eu(III) darauf hin, dass die CSH-Phasen zunächst mit PBTC abgesättigt werden, bevor PBTC beginnt, Eu(III) zu komplexieren und somit aus dem Feststoff zu lösen. Bei Verlängerung des Experiments mit PBTC auf die doppelte Menge an Eluent (bei sonst gleichen Bedingungen) erhöht sich das Eu(III)-Leaching auf etwa $4,5\%$.

In einem weiteren Schritt wurde eine mögliche Verdrängung der dotierten Analyten in den C-S-H-Phasen durch Tb(III) und Fe(III) untersucht. Tb(III) und Fe(III) wurden im 100-fachen Überschuss, analog zum PBTC, injiziert. Auch hier konnte ein höheres Si(IV)- und Ca(II)-Leaching nachgewiesen werden (in H_2O : $9\% \text{ Si(IV)} / 15\% \text{ Ca(II)}$; mit Tb(III) oder Fe(III): $20\% \text{ Si(IV)} / 30\% \text{ Ca(II)}$). Für Mo(VI) wurde die Remobilisierung durch Zugabe der beiden

Verdrängungsmetalle erniedrigt (H₂O: 69%; Tb(III): 65%; Fe(III): 63%). Auf die Eu(III)- und U(VI)-Remobilisierung konnte kein Einfluss festgestellt werden.

4. Geplante Weiterarbeiten

Geplant ist die Untersuchung des Ausfällungs- und Adsorptionsverhaltens eines neuen Waste-Cocktails bestehend aus Se(IV), Zr(IV), Mo(VI), Pd(II), Cs(I), Eu(III), Re(VI), Th(IV) und U(VI) bei pH = 8 und pH = 11, bei verschiedenen Ionenstärken an Calcium-Bentonit. Zudem ist der Einfluss von Fe(0)-Nanopartikeln Gegenstand weiterer Untersuchungen. Die Erstellung des Abschlussberichtes wird begonnen.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Haben A., Brix K., Bachmann N. and Kautenburger R. (2024) Sorption experiments as efficient as possible: Mini-column experiments (MCE) using HPLC-ICP-MS coupling with a new data analysis approach to determine sorption parameters. *Microchem. J.* 206, 111511.

Kautenburger R., Brix K., Haben A. (2024) Geochemical influence on the radionuclide mobility in geological formations analysed by ICP-MS and ICP-QQQ coupling methods. NRC-10 Konferenz, 25.-30.08.2024, Brighton, UK (Vortrag).

Haben A., Bachmann N., Brix K., Kautenburger R. (2024) Fast and dynamic sorption experiments for repository research: Method development for mini-column sorption experiments with HPLC and ICP-MS. NRC-10 Konferenz, 25.-30.08.2024, Brighton, UK (Poster).

Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer: Technische Universität München		Förderkennzeichen: 02 E 11860E
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt E		
Zuordnung zu den FuE-Feldern des Förderprogramms: C2.3 Geotechnische und technische Barrieren C3.1 Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-) Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2020 bis 31.3.2025	Berichtszeitraum: 01.07.2024 bis 31.12.2024	
Gesamtkosten des Vorhabens: 691.168,00 EUR	Projektleiter: Dr. S. Krüger	

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Vorhabensziele:

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

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

Das Untersuchungsprogramm umfasst folgende Arbeitspakete (AP):

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

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

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP 1.1: Modelle; AP 1.4: Vergleich Th(IV) und U(IV); AP 1.5: Sorption und Konkurrenz Fe; AP 2: Silikatkomplexe; AP 3: Unterstützung Experimente.

Modellierungen zur Sorption von Th(IV) im Vergleich zu U(IV) in CSH wurden für $C/S = 1$ im Wesentlichen abgeschlossen (AP 1.4). Letzte Ergebnisse zeigen am Modell Tobermorit, dass der Einbau in die CaO-Schicht für beide Gitterplätze entartet und bevorzugt ist. Plätze in der Zwischenschicht sind für Th(IV) mehr als 30 kJ/mol und für U(IV) mehr als 40 kJ/mol weniger stabil. Für zwei Plätze, an denen Sorptionskomplexe mit einer unterschiedlichen Zahl von Hydroxoliganden optimiert werden konnten, ist die Reaktionsenergie der Hydrolyse für Th positiver als für U(IV) in Übereinstimmung mit dem größeren Radius von Th^{4+} . Die Ergebnisse stützen weiter klar die Interpretation von EXAFS-Daten zur Sorption von An(IV) als Einbau in die CaO-Schicht. Ausgehend von exploratorischen Vorooptimierungen aus dem Vorgängerprojekt wurde die vollständige Equilibrierung und Optimierung der Cm(III)-Sorption zur Unterstützung eines EXAFS-Experiments eines Projektpartners aufgenommen (AP 3). Erste Ergebnisse zeigen Sorptionskomplexe in der Zwischenschicht mit 1-3 Hydroxoliganden und Koordinationszahlen von 5-7. Der Einbau in die CaO-Schicht ist auf beiden Plätzen nahezu entartet, im Gegensatz zu An(IV) aber nur ähnlich stabil wie manche Plätze in der Zwischenschicht. Die Sorption an Fehlstellen in den Silikatketten ist wie für U(VI) ungünstig. Untersuchungen zur Sorption von Fe(II) an CSH zur Aufklärung der Strukturunterschiede zwischen Experiment und Theorie wurden für 11 Å-Tobermorit fortgesetzt (AP 1.5), wobei bisher die Befunde an 14 Å-Tobermorit im Wesentlichen bestätigt werden. Weitere Auswertungen und Rechnungen mit gegebenem Spin von Tobermoritmodellen mit gleichzeitiger Sorption von Uran(IV/VI) und Fe(III/II) zur direkten Untersuchung eines Konkurrenzeffekts (AP 1.1, 1.5) führten zu keinen neuen Ergebnissen und unterstützen weiter die Interpretation, dass neben U(VI) und U(IV) auch U(V) als Intermediat vorkommen kann.

Rechnungen zu U(VI)-Silikatkomplexen wurden für U(VI)-Hydroxosilikatkomplexe fortgesetzt und ein Vergleich von An/Ln-Mono-Orthosilikatkomplexen wurde begonnen. (AP 2.1). Das System der U(VI)-Hydroxo-Orthosilikatkomplexe wurde um drei Spezies mit mehreren Liganden erweitert. Im Gegensatz zum Experiment wird die Silikatbindung als schwächer als die Hydroxobindung berechnet und es wird die Existenz einer größeren Zahl ternärer Komplexe nahegelegt. Eine Abschätzung von Stabilitätskonstanten zur Erweiterung und Überprüfung gemessener Daten wird derzeit versucht. Der Vergleich der Stabilität verschiedener An/Ln-Mono-Orthosilikatkomplexe im Vergleich zum Experiment (PSI-Nagra) zeigt Abweichungen von den sehr ähnlichen gemessenen Werten, besonders für Np(V). Dieser Komplex wird als ähnlich stabil wie An(VI)- und An/Ln(III)-Komplexe gemessen, jedoch als deutlich schwächer berechnet, in Übereinstimmung mit der niedrigeren Ladung von NpO_2^+ .

Rechnungen zu La-Gluconat-Komplexen zur Unterstützung von Experimenten der Projektpartner (AP 3) wurden im Wesentlichen abgeschlossen. Normalenmoden der Strukturminima in Lösung ergaben teils wenige niedrige imaginäre Frequenzen und werden noch überprüft. Der Trend der Abhängigkeit der Gluconatkomplexierungsstärke von der An/Ln-Ionenladung zeigt geringe Abweichungen zwischen Experiment und Theorie, die noch untersucht werden.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP 1.4: Vergleich Th(IV) und U(IV); AP 1.5 Sorption und Konkurrenz Fe; AP 2: Silikatkomplexe; AP 3: Unterstützung Experimente.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Vortrag: I. Chiorescu, S. Krüger *Quantum chemical studies of binary and ternary U(VI) hydroxo silicate complexes*, Workshop ATAS-AnXAS 2024, Karlsruhe, 7.-11.10. 2024.
I. Chiorescu, S. Krüger, *Density Functional Modeling of Ternary Am(III) Hydroxo Complexes with Ca or Mg Counterions. Do Mg Stabilized Species exist?* Appl. Geochem. 174 (2024) 106159.

S. Krüger, I. Chiorescu, A. Kremleva, *How do Actinide and Iron Ions Interact with Cement?* in *High Performance Computing in Science and Engineering – Garching/Munich 2024*, Eds.: P. Bastian, D. Kranzlmüller, H. Brüche, and G. Mathias (2024). Leibniz-Rechenzentrum der Bayerischen Akademie der Wissenschaften, 2024, S. 86.

Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer: Universität Potsdam (Physikalische Chemie), Am Neuen Palais 10, 14469 Potsdam		Förderkennzeichen: 02 E 11860F
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen – Phase II (GRaZ II) – Teilprojekt F		
Zuordnung zum FuE-Programm: C2.3 Geotechnische und technische Barrieren C3.1 Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-) Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2020 bis 31.12.2025	Berichtszeitraum: 01.07.2024 bis 31.12.2024	
Gesamtkosten des Vorhabens: 546.703,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Michael U. Kumke	

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete²

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

AP 1: Radionuklid-Rückhaltung an Zementalterationsphasen und Bentonit unter hyperalkalinen Bedingungen bei mittleren bis hohen Ionenstärken

AP 2: Wechselwirkung von Actiniden mit organischen und silicatischen Ligandensystemen

AP 3: Nachwuchsförderung im Bereich der nuklearen Entsorgung

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

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

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Die begonnenen Experimente zur Wechselwirkung von Eu(III) mit C-S-H-Phasen unter Variation des C/S-Verhältnisses wurden fortgeführt. Die jeweiligen Proben wurden regelmäßig über die Dauer von nun mehr mehreren hundert Tagen mittels TRLFS untersucht, um so die Bedeutung des C/S-Verhältnisses für Sorption bzw. die Bildung einer Ca-Si-Eu-Mischphase, die in Konkurrenz zur Sorption von An(III) an die C-S-H-Phasen steht, zu erfassen. Die Experimente mit künstlichen Porenwässern (Porenwasserchemie definiert über Gehalt an: NaCl, CaCl₂, Kieselsäure, 9.7 < pH < 12, An- und Abwesenheit von NTA) wurden fortgeführt. Es wurde in den Proben entweder die Ca- oder Si-Konzentration variiert und ggfs. die ausgefällte Mischphase mittels TRLFS charakterisiert. Je nach pH-Wert und C/S-Verhältnis entstand neben einer Mischphase zunächst auch eine Ln(III)-Hydroxidphase, welche mittels TRLFS und anschließender PARAFAC-Auswertung zugeordnet wurde. Die zeitliche Transformation der Festphasen wurde erfasst. Die Auswertungen dazu werden aktuell durchgeführt. Die Arbeiten zum binären Ln(III)/Gluconat-System (Ln=Eu, Sm) in Kollaboration mit dem HZDR und der JGU Mainz wurden mit Fokus auf den (hyper)alkalinen Bereich (pH 10 und 12) sind abgeschlossen und ein Manuskript wurde eingereicht (s.u.).

Die Transienten-Absorptionsspektroskopie (TAS) von Uranyl-Systemen wurde fortgeführt. Mittels TAS wurde die Charakterisierung der Absorptionskinetik (ps- bis ms-Zeitbereich) zur Speziationsuntersuchung verschiedener U(VI)-Hydrolyse Komplexe weiter verfolgt. Es wurde sich auf die Untersuchung von mehrkernigen Uranyl-Komplexen konzentriert. Komplementär wurden die Proben zudem auch mittels TRLFS bei verschiedenen Temperaturen charakterisiert und mithilfe von PARAFAC bzgl. der Speziation analysiert. Flashphotolyse und TAS-Messungen an Salicylat-Systemen wurden abgeschlossen, so dass die Speziation des Liganden für die relevanten Matrixbedingungen (z.B. hoher pH und Ionenstärke) vorliegt.

4. Geplante Weiterarbeiten

Experimente in künstlichen Porenwässern werden bei weiteren pH-Werten zwischen pH 10 und 12 durchgeführt werden, wobei weiterhin der Einfluss von [Ca] und [Si], der Ionenstärke und des pH-Wertes auf die Bildung der Ca/Si/Eu-Mischphase als Konkurrenz zu Bildung anderer Festphasen untersucht werden. Der Einfluss von NTA (als organischem Liganden) auf die Mischphasen – bzw. Festphasenbildung wird ebenfalls weiter erfasst werden. Dazu werden Experimente zum Einfluss der Zugabereihenfolge der Einzelkomponenten Ca, Si und Eu sowohl in den künstlichen Porenwässern als auch in C-S-H-Proben gemacht. Hierbei steht die Frage inwieweit die Zugabe der Liganden zur Auflösung oder zu einer veränderten Zusammensetzung der bereits ausgefällten Ca/Si/Eu-Mischphase im Mittelpunkt. Die Auswertung der Sorptionsexperimente mit dem kommerziellen C-S-H-Material Circosil (C/S≈0.8) wird abgeschlossen werden. In diesen scheint ebenfalls die Bildung einer Ca/Si/Eu-Mischphase beobachtet zu werden und die TRLFS Daten müssen bzgl. der Speziation mittels PARAFAC neu ausgewertet. Es sollen diese Daten dann mit den der eigenen hergestellten C-S-H-Phasen verglichen werden. TAS- und Flash-Photolyse-Experimente an Uranyl sowie dessen Komplexen mit niedermolekularen organischen Liganden, die als Proxy für Zementorganik dienen, werden fortgeführt. Besonders mehrkernige Komplexe sind Ziel der Untersuchungen und werden spektroskopisch (TRLFS, TAS, Flash-Photolyse) zum Zweck der Speziation charakterisiert. Komplementär werden die Arbeiten zur Untersuchungen organischer Liganden und deren Komplexe mit Metallen (z.B. Fe, Eu) fortgeführt. Die TAS- und Flash-Photolyse-Datenanalyse von Salicylat-Europium Komplexen bei hohen pH-Werten wird finalisiert

5. Berichte, Veröffentlichungen

Sophie Zenker, Janik Lohmann, Ion Chiorescu, Sven Krüger, Michael Kumke, Tobias Reich, Katja Schmeide, Jerome Kretzschmar; „Complexation of Ln(III) ions by gluconate: Joint investigation applying TRLFS, CE-ICP-MS, NMR, and DF calculations“; submitted to Inorganic Chemistry (2024)

Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer: TU Dresden, Professur für Radiochemie und Radioökologie, Sachgebiet Strahlenschutz		Förderkennzeichen: 02 E 11860G
Vorhabensbezeichnung: Verbundvorhaben: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt G		
Zuordnung zum FuE-Programm: C2.3 Geotechnische und technische Barrieren C3.1 Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-) Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2023 bis 31.12.2024	Berichtszeitraum: 01.07.2024 bis 31.12.2024	
Gesamtkosten des Vorhabens: 450.133,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Thorsten Stumpf	

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

Die Arbeiten dieses Projekt sind im Wesentlichen in das Verbundarbeitspaket AP2 „Wechselwirkung von Actiniden mit organischen und silikatischen Liganden“ angesiedelt. Das AP-TU1 beinhaltet die thermodynamische Charakterisierung der Protonierung des PBTC-Liganden, die ausführliche thermodynamische und strukturelle Charakterisierung der Komplexierung der Actinide (u.a. Am(III), Cm(III), Pu(III), Th(IV), U(VI), ggf. inaktive Analoga Eu(III), Nd(III)) mit dem PBTC-Liganden im sauren und alkalischen pH-Bereich als Funktion der Ionenstärke an NaCl und CaCl₂ sowie Untersuchungen zum Einfluss von Konkurrenzmetallionen (z.B. Fe²⁺) auf die Komplexierung. Entsprechende thermodynamische Standarddaten zur Komplexbildung ($\log_{10}\beta_{n,m}^0$, $\Delta_r H_m^0$, $\epsilon_{j,k}$) werden aus SIT-Modellierungen abgeleitet. Im AP-TU2 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, CaCl₂) und des pH-Wertes bestimmt werden.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

1) UV-Vis-Untersuchungen wurden durchgeführt, um die Wechselwirkung von U(IV) mit 2-Phosphonobutan-1,2,4-tricarbonsäure (PBTC, Zementadditiv) im pH-Bereich von 1 bis 11 zu untersuchen. Hierfür erfolgten pH-Titrationen von U(IV)-Lösungen mit PBTC-Überschuss. Es konnte gezeigt werden, dass U(IV) bis zu einem pH-Wert von 11 mit PBTC komplexiert. Allerdings treten ab einem pH-Wert > 7 Ausfällungen von U(IV)-Verbindungen auf, die derzeit eine weitere spektroskopische Charakterisierung der U(IV)-PBTC-Komplexe in Lösung erschweren.

Des Weiteren wurden zeitabhängige UV-Vis-Untersuchungen zur Reduktion von U(VI) durch PBTC in Abhängigkeit der PBTC-Konzentration durchgeführt. Im sauren pH-Bereich ($\text{pH} < 2$) konnte gezeigt werden, dass U(VI) unter Einfluss von UV-Licht durch PBTC zu U(IV) reduziert wird. Die Reduktion von U(VI) beginnt bereits bei einem Verhältnis von U(VI) zu PBTC von weniger als 1:1 und wurde sogar bei einem Verhältnis von 1:0,1 beobachtet. Sie tritt schon bei Bestrahlungszeiten von weniger als 30 Minuten auf. Bei deutlichem PBTC-Überschuss (1:10) ist nach ca. 190 min mittels UV-Vis-Spektroskopie kein U(VI) mehr nachweisbar. Es hat sich ein löslicher U(IV)-PBTC-Komplex gebildet. Bei einem pH-Wert von etwa 7 konnte jedoch keine Reduktion von U(VI) durch PBTC nachgewiesen werden.

2) Die NMR-spektroskopischen Untersuchungen im An(III)/Ln(III)-PBTC-System wurden mit verschiedenen Lanthaniden (La, Lu, Eu) fortgesetzt. Bei den P-31-NMR-Messungen zeigte sich bei allen untersuchten Lanthaniden eine Überlagerung der Signale des freien und des komplexierten PBTC-Liganden. Zur Verbesserung der Signaltrennung wurden Tieftemperaturmessungen sowie C-13-NMR-Spektren durchgeführt. Die Auswertung der Spektren ist derzeit in Bearbeitung.

4. Geplante Weiterarbeiten

- 1) Veröffentlichung der Ergebnisse des U(VI)-PBTC-Systems
- 2) Erstellung des Abschlussberichtes

5. Berichte, Veröffentlichungen

Konferenzbeitrag: Vortrag

A. Wollenberg, J. Kretzschmar, B. Drobot, S. Tsushima, M. Acker, S. Taut, T. Stumpf: Investigation of trivalent actinide and lanthanide complex speciation with the cement additive PBTC, 10th International Conference on Nuclear and Radiochemistry – NRC10 10th INTERNATIONAL

CONFERENCE ON NUCLEAR AND RADIOCHEMISTRY , 25.-30. August 2024, Brighton, UK

Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer: Universität Heidelberg		Förderkennzeichen: 02 E 11860H
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt H		
Zuordnung zum FuE-Programm: C2.3 Geotechnische und technische Barrieren		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2020 bis 31.12.2025	Berichtszeitraum: 01.07.2024 bis 31.12.2024	
Gesamtkosten des Vorhabens: 403.292,00 EUR	Projektleiter: Frau Prof. Dr. Petra J. Panak	

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Das Thema des Forschungsvorhabens ist die Rückhaltung von Radionukliden (Actiniden) im Nahfeld eines Endlagers für Wärme entwickelnde radioaktive Abfälle in Tonsteinformationen gemäß dem „Standortmodell NORD“. Für den Sicherheitsnachweis eines solchen Endlagers gibt es Wissenslücken zum Einfluss von gelöstem Eisen, das bei der Korrosion der Einlagerungsbehälter freigesetzt wird, sowie von organischen und silicatischen Liganden, die aus der Beton- bzw. Zementkorrosion der technischen Barriere resultieren. Deshalb soll der Einfluss von Eisen sowie der organischen und silicatischen Liganden auf die Radionuklidrückhaltung an Zementkorrosionsphasen und dem Bentonitpuffer unter hyperalkalinen Bedingungen bei mittleren bis hohen Ionenstärken quantifiziert werden. Dazu werden die Prozesse Sorption, Diffusion, 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

AP 2.1 Komplexierung von Actiniden mit ausgewählten organischen Referenzliganden

AP 2.2 Komplexierung von Actiniden mit ausgewählten Zementadditiven

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

AP 3 Nachwuchsförderung im Bereich der nuklearen Entsorgung

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

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im Rahmen von AP 2.3 wurden mittels zeitaufgelöster Laserfluoreszenzspektroskopie (TRLFS) Kinetikmessungen zur Stabilität von Cm(III)-Silicatkomplexen ($[Si] = 5 \cdot 10^{-3} \text{ M}$) unternommen. Im Vordergrund stand die Frage nach der Stabilität gegenüber der Hydrolyse im pH-Wertbereich von 9 - 11 bei unterschiedlichen Ionenstärken. Für die niedrige Ionenstärke von $I_m = 5 \cdot 10^{-3} \text{ mol/kg H}_2\text{O}$ wurde bei pH = 10 eine initiale Cm-Konzentration von $[Cm] = 22 \text{ nmol/L}$ in Lösung bestimmt, dahingegen lag die initiale Cm-Konzentration bei pH = 11 bei $[Cm] = 14 \text{ nmol/L}$. Unter beiden Bedingungen war eine signifikante Abnahme der Cm-Konzentration nach 24 Stunden zu beobachten, wobei sich der höhere pH-Wert in einer stärkeren Reduktion der Konzentration auswirkte. Somit ist ersichtlich, dass die silicatischen Spezies bei niedriger Ionenstärke in diesem pH-Bereich nicht stabil sind und der Hydrolyse unterliegen. Bei der höheren Ionenstärke ($I_m = 3 \text{ mol/kg H}_2\text{O}$) lag bei pH = 10 zunächst eine Cm-Konzentration von 36 nmol/L in Lösung vor. Nach einem Tag konnte auch hier eine rapide Abnahme der Cm-Konzentration beobachtet werden ($[Cm] = 4 \text{ nmol/L}$). Bei pH = 11 erfolgte direkt eine vollständige Hydrolyse. Insgesamt zeigen die Ergebnisse, dass unabhängig von der Ionenstärke im pH-Bereich ≥ 10 die vorliegenden silicatischen Spezies auf Dauer nicht stabil sind und der Hydrolyse unterliegen.

Im Rahmen von AP 2.2 wurde mittels TRLFS die Speziation von Cm(III) mit Glenium® 51 (Gle) als Funktion des pH-Wertes untersucht. Dafür wurden verschiedenen Gle-Konzentrationen ($[Gle] = 0.1$ und 1.17 g/kg) gewählt. Hierbei konnte die Bildung der Spezies $Cm(OH)Gle$ und $Cm(OH)_2Gle$ durch Steigungsanalysen bestätigt werden. Die Stabilitätskonstanten $\log \beta_2(Cm(OH)Gle) = 12.7 \pm 0.6$ und $\log \beta_3(Cm(OH)_2Gle) = 16.4 \pm 0.8$ wurden ermittelt. Zusätzlich wurden die Lebensdauern aller Spezies bestimmt: $\tau(CmGle) = 76 \pm 4 \mu\text{s}$, $\tau(Cm(OH)Gle) = 112 \pm 6 \mu\text{s}$ und $\tau(Cm(OH)_2Gle) = 124 \pm 6 \mu\text{s}$. Anschließend wurde die Speziation bei erhöhter Ionenstärke untersucht. Bei $I_m = 1.01 \text{ mol/kg}$ wurden die Stabilitätskonstanten $\log \beta_2(Cm(OH)Gle) = 12.7 \pm 0.6$ und $\log \beta_3(Cm(OH)_2Gle) = 16.3 \pm 0.8$ bestimmt. Diese Ergebnisse zeigen, dass die Ionenstärke keinen signifikanten Einfluss auf die Stabilität der Komplexspezies hat.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Speziationsuntersuchungen zur Wechselwirkung von Cm(III) mit Glenium® 51 als Funktion des pH-Wertes bei weiteren Ionenstärken ($I_m = 2.5$ und 3.5).
- Untersuchungen zur Stabilität der Cm(III)-Gleniumkomplexe bei zementrelevanten pH-Werten.

5. Berichte, Veröffentlichungen

- S. Özyagan, T. Sittel, P. J. Panak: Complexation of Cm(III) with monosilicic acid in chloride media, Applied Geochemistry (eingereicht).
- Raoul Gillmeister Komplexierung von Cm(III) mit Silicaten in Abhängigkeit des pH-Wertes, Forschungspraktikum im Rahmen des Masterstudiums Chemie, Universität Heidelberg.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 11870A
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren - Phase II (UMB II), Teilprojekt A		
Zuordnung zum FuE-Programm: C2.3 Geotechnische und technische Barrieren C3.1 Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-)Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung		
Laufzeit des Vorhabens: 01.01.2021 bis 30.06.2025	Berichtszeitraum: 01.07.2024 bis 31.12.2024	
Gesamtkosten des Vorhabens: 1.226.887,00 EUR	Projektleiter: Dr. Artur Meleshyn	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Die Ziele des Verbundvorhabens sind: 1. Aufklärung des Mechanismus der Zersetzung von Karbonaten und CO₂-Freisetzung in Bentoniten, 2. Bestimmung der Gründe für die beobachtete Acidität der Bentonite bei erhöhten Temperaturen, 3. Beitrag zur Aufklärung des Lösungs- bzw. Umwandlungsmechanismus der 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 AP 1 „Zersetzung von Karbonaten und CO₂-Freisetzung“ (Federführung: GRS) sollen dafür im GRS-Labor Versuche mit Bentoniten, reinen Mineralphasen und aus diesen hergestellten Mineralgemischen in Metallzylindern bei 120°C sowie anschließende Gasanalysen und Bestimmungen der Karbonatgehalte, pH-Werte und Zusammensetzungen der Kontaktlösungen durchgeführt werden. Die Versuche und ihre Auswertung sollen durch die unterstützende geochemische Modellierung begleitet werden. Im AP 6 koordiniert die GRS die Arbeiten im Verbundprojekt.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im Berichtszeitraum wurden 43 Versuche bei 140 °C mit 0,1 M NaCl Lösung, Calcit (CaCO_3), Ankerit ($\text{Ca}_2\text{FeMg}(\text{CO}_3)_4$) sowie Quarz, Kaolin, Glimmer und Vermikulit durchgeführt. Glimmer und Vermikulit werden als Vertreter für die auf dem Markt nicht erhältlichen Illit und Montmorillonit eingesetzt, die zusammen mit Calcit, Quarz und Kaolin die häufigsten Bestandteile eines Tons darstellen. Ankerit wurde aufgrund einer Literaturrecherche zum Vergleich mit Calcit hinsichtlich der Zersetzungsstabilität und der CO_2 -Erzeugung herangezogen. Zu diesem Zweck wurden außerdem in 14 weiteren Versuchen Karbonatminerale Rhodochrosit, Strontianit, Kutnahorit, Magnesit, Siderit, Aragonit und Dolomit untersucht. Messgrößen dieser Versuche sind der CO_2 -Gehalt in der Gasphase der Reaktoren sowie der Karbonatgehalt der eingesetzten Mineralmischungen. Die Auswertung dieser Messgrößen soll helfen, die zur Karbonatzersetzung in Tonen beitragenden Minerale zu identifizieren. Als Hilfsmessgrößen werden Gehalte an Ca, Mg, K, Na, Si sowie Gesamtkohlenstoff und anorganischem Kohlenstoff in der Lösung ausgewertet.

Die Koordination des Verbundprojektes bestand in der Unterstützung der Organisation des achten Projekt-Workshops, welches am 25.-26. November 2025 durch das Institut für Anorganische Chemie der Leibniz Universität Hannover ausgerichtet wurde.

4. Geplante Weiterarbeiten

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

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine

Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer: Helmholtz-Zentrum Dresden – Rossendorf e. V. Institut für Ressourcenökologie		Förderkennzeichen: 02 E 11870B
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt B		
Zuordnung zum FuE-Programm: C3.1 Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-) Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung		
Laufzeit des Vorhabens: 01.01.2021 bis 30.06.2025	Berichtszeitraum: 01.07.2024 bis 31.12.2024	
Gesamtkosten des Vorhabens: 683.825,00 EUR	Projektleiter: Dr. Nicole Matschiavelli	

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

Beziehung zu anderen Vorhaben

Innerhalb der Kooperationspartner (Förderkennzeichen 02E11870)

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

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

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

1. Ansetzen und Beprobieren von Mikrokosmen über einen Zeitraum von Mindestens 12 Monaten
2. Bestimmung bio-geochemischer Parameter (z.B. pH-Wert, E_h, Fe(II/III)) in Mikrokosmen

3. Extraktion von DNA aus inkubierten Mikrokosmen und Bentonit-Ausgangsmaterialien
4. Bestimmung mikrobieller Diversität (PCR, RISA, Sequenz-Analyse)
5. Mikroskopische Analyse der Gusseisen-Korrosion mittels SEM-EDX
6. Ggf. Anreicherung von Mikroorganismen aus inkubierten Mikrokosmen

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Die mikrobielle Population der Bentonite B27 und GMZ-001 und deren Einfluss auf die Korrosion von Gusseisenplättchen (Typ GGG40) soll mit Hilfe von anaeroben Mikrokosmen analysiert werden. Die Ansätze enthalten einen der beiden Bentonite, Gusseisenplättchen und synthetische Opalinuston-Porenlösung. Für die Simulation einer beginnenden Korrosion, wurden ausgewählte 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.

Die DNA konnte im 8. Berichtszeitraum aus weiteren 10 Ansätzen, welche für 994 Tage bei 37°C inkubiert wurden, erfolgreich isoliert und sequenziert werden. Des Weiteren wurden von inkubierten Gusseisen-Plättchen, welche ebenfalls für 994 Tage bei 37°C in GMZ- oder B27-Mikrokosmen inkubiert wurden, Querschnitte angefertigt und durch SEM-EDX charakterisiert.

Nach Auswertung aller bisher generierten Datensätze (Sequenzanalyse, Metallanalyse und Analyse bio-geochemischer Parameter) zeigten sich deutliche Unterschiede im Korrosionsverhalten von Gusseisen-Plättchen, wenn diese mit autoklavierten oder nicht autoklavierten B27 Bentonit bei 37°C inkubiert wurden. Ansätze, welche mit nicht-autoklavierten B27-Bentonit inkubierten, zeigten im Vergleich zu Ansätzen, welche mit 2-fach autoklavierten B27 inkubiert wurden, eine geringere Eisen-Konzentration im Porenwasser und im Bentonit, eine niedrigere Fe(II)- und Phosphor-Freisetzung in Lösung, eine geringere H₂- und CO₂-Konzentration sowie einen geringeren Druck in der Gasphase. Die entsprechenden Gusseisenplättchen zeigten Präzipitate auf der Metalloberfläche, welche hauptsächlich Schwefel, Eisen, Calcium und Kohlenstoff beinhalten (Pyrit und Calcit) und möglicherweise eine Passivierungsschicht bilden. Entsprechende Plättchen, welche mit 2x-autoklavierten B27 inkubierten, zeigten diese Präzipitate nicht.

Gusseisenplättchen, welche mit GMZ-Bentonit bei 37°C inkubierten, zeigten nach 994 Tagen deutliche Veränderungen an der Gusseisenoberfläche, unabhängig ob der GMZ Bentonit zuvor autoklaviert wurde oder nicht. Diese Veränderungen könnten durch den Prozess der „*interface-coupled dissolution-reprecipitation*“ verursacht worden sein und unterscheiden sich deutlich vom Korrosionsverhalten jener Plättchen, welche mit B27 inkubierten.

4. Geplante Weiterarbeiten

Im 9. Berichtszeitraum ist die finale Beprobung der Mikrokosmen nach 1281 Tagen Inkubation geplant (t6). Des Weiteren soll die DNA aus ausgewählten t6-Proben isoliert und sequenziert werden. Ausgewählte Gusseisenplättchen werden durch SEM-EDX charakterisiert. Alle erhaltenen Daten werden final ausgewertet und im Abschlussbericht zusammenfassend dargestellt.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Publikationen:

Sushko, V; Dressler, M.; Ting-Shyang Wei, S.; Neubert, T.; Kühn, L.; Cherkouk, A.; Stumpf, T.; Matschiavelli, N. (2024); No signs of microbial-influenced corrosion of cast iron and copper in bentonite microcosms after 400 days, *Chemosphere*, 364: 143007 doi: 10.1016/j.chemosphere.2024.143007

Vorträge:

Matschiavelli, N., Microbial Influence on Cast Iron Corrosion under Repository-Relevant Conditions; 8th project meeting UMB-II, Hannover, 28.-29.11.2024.

Wei, S. T.-W.; Kluge, S.; Chekhonin, P.; Dykas, V.; Kaden, C.; Matschiavelli, N.; The microbial community in bentonites B27 and GMZ and its influence on cast iron corrosion; Clay Conference, Hannover, 24.-28.11.2024

Matschiavelli, N., The microbial communities in bentonites and its influence on cast iron corrosion; Workshop on Bentonite in Crystalline Rock, 03.-04.12.2024 (online, organized by GRS)

Poster:

Keine in diesem Berichtszeitraum

Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer: Universität Greifswald, Domstr. 11, 17489 Greifswald		Förderkennzeichen: 02 E 11870C
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren- Phase II (UMB II), Tielprojekt C		
Zuordnung zum FuE-Programm: C2.3 Geotechnische und technische Barrieren		
Laufzeit des Vorhabens: 01.01.2021 bis 30.06.2025	Berichtszeitraum: 01.07.2024 bis 31.12.2024	
Gesamtkosten des Vorhabens: 319.520,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. L.N. Warr	

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

AP-Nr. 3.1: "Reinigung und Analyse von Smektitproben und anderen Mineralen"

AP-Nr. 3.2: "Mischung und Charakterisierung von synthetischen Bentonitproben für Batch-Reaktor-Experimente an GRS, UG und BGR"

AP-Nr. 3.3: "Monitoring und mineralogische/geochemische Analysen der Experimente (XRD, XRF, CEC usw.)"

AP-Nr. 3.4: "Weitergehende Analyse von Batch-Experimenten und Datenanalysen"

AP-Nr. 3.5: "Elektronenmikroskopische Untersuchung der Versuchsprodukte"

AP-Nr. 3.6: "Datenanalyse und Vergleich von synthetischen Bentoniten mit natürlichen Mischungen"

AP-Nr. 3.7: "Auswertung (Mechanismen)"

AP-Nr. 3.8: "Berichte"

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Alle alten Arbeitspakete von AP-Nr. 3.1 bis 3.7 sind nun für die Experimente vor der Projektverlängerung im Januar 2024 abgeschlossen und die Ergebnisse als wissenschaftlicher Artikel in Applied Clay Science veröffentlicht (Sudheer kumar et al., 2024).

Da das Projekt um weitere 18 Monate verlängert wurde, haben wir weitere Batch-Reaktorexperimente bei niedrigeren und höheren Temperaturen, unterschiedlichen Reaktionszeiten und K^+ -Konzentrationen (sowohl für KCl als auch für K-Oxalat) durchgeführt und uns dabei auf die Kinetik der Illitisierungsreaktionen konzentriert. Die Ergebnisse dieser Untersuchungen können dazu verwendet werden, die Reaktionskinetik und die Geschwindigkeit der Smektitumwandlung mit und ohne organische Katalysatoren so zu bestimmen, dass sie als Vorhersageinstrument genutzt werden können. Wir haben nun die AP-Nr. 3.1 und 3.2 für die kinetischen Experimente abgeschlossen. Wir sind jetzt dabei, die neuen AP-Nr. 3.3, 3.5, 3.6 und 3.7 fertigzustellen, einschließlich XRD-Messungen, Transmissionselektronenmikroskopie, Flüssigkeitschemie und Rietveld-Verfeinerung.

Fixed temperature (180°C), K^+ -concentration (0.03M), and **varying time**

K - oxalate	31 days	62 days	93 days	124 days	155 days
	First set	April 2024	May 2024	June 2024	July 2024

Fixed temperature (180°C), time (31 days), and **varying K^+ -concentration (20 rpm)**

K - oxalate	0.01 M	0.03M	0.3M	0.5M
	April 2024	First set	First set	April 2024
KCl	0.03M	0.1M	0.3M	
	First set	April 2024	April 2024	

Fixed time (31 days), K^+ -concentration (0.03M) and **varying temperature**

K - oxalate	160°C	180°C	200°C	220°C
	June 2024	First set	August 2024	July 2024

6

Abbildung 1: Zusammenfassung der kinetischen Experimente, die im Rahmen der Projekts inklusive der Verlängerung durchgeführt wurden.

Wir haben die Bildung von Hämatit in den Batch-Experimenten beobachtet, die mit reiner Smektitfraktion und 0,1 M NaCl durchgeführt wurden. Da dieses Phänomen in vielen früheren Studien nicht beobachtet wurde, führen wir weitere Analysen durch. Da dies auch einige Einblicke in den allgemeinen Alterationsmechanismus von Smektiten geben wird, wird der Umfang dieser Studie auch als relevant für das UMB-II-Projekt angesehen. Wir haben nun mehrere XRD-Analysen, Rietveld-Verfeinerungen und TEM-Analysen für die Studie zum Verständnis der Kristallwachstumskinetik von Hämatiten abgeschlossen.

Die XRD-, Rietveld-Verfeinerungs- und SEM-EDX-Analysen an den vom HZDR bereitgestellten Proben stehen kurz vor dem Abschluss.

4. Geplante Weiterarbeiten

Wir haben weitere Proben vom HZDR in Dresden erhalten und planen, ähnliche Analysen an den Bentoniten durchzuführen, wie im obigen Abschnitt beschrieben.

Wir müssen noch die Lösungsschemie der kinetischen Batch-Experimente bestimmen, was mit Mikrowellenplasma-Atomemissionsspektroskopie geschehen wird. Außerdem müssen wir bis März 2025 die Rietveld-Verfeinerung aller Proben, die hochauflösende TEM-Bildgebung und die Beugung ausgewählter Flächenelektronen für alle Proben abschließen.

Nach Abschluss der o.g. Analysen planen wir, den Projektabschlussbericht (AP-Nr. 3.8) bis Juni 2025 fertig zu stellen sowie eine Veröffentlichung einzureichen.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Sudheer Kumar, R., Warr, L.N., Grathoff, G., Thombare, B.R., 2024. Advanced smectite alteration and the role of accessory reactants at 180°C: New experimental constraints on the stability of bentonite. *Applied Clay Science* 260, 107540.

Warr, L.N., Thombare, B., Sudheer Kumar, R., Peltz, M., Podlech, C., Grathoff, G.H. (2024). Determining the stoichiometric composition of Wyoming montmorillonite using improved transmission electron microscopy - energy dispersion X-ray (TEM-EDX) techniques. *Clays and Clay Minerals* 72, e25, 1–20.

Sudheer Kumar, R., Warr, L.N., Grathoff, G., Thombare, B. Thermochemical alterations in montmorillonite: Experiment constraints in the presence of organic anion ligands. 9th Clay Conference, Hannover, Germany. (Poster presentation), 25.11.2024 - 28.11.2024.

Sudheer Kumar, R., Warr, L.N., Grathoff, G., Thombare, B. Advanced smectite alteration and the role of accessory reactants at 180 °C: New experimental constraints on the stability of bentonite. 11th Middle European Clay Conference 2024, Pilsen, Czech Republic. (oral presentation), 15-09.2024 - 20.09.2024.

Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer: Technische Universität München		Förderkennzeichen: 02 E 11870D
Vorhabensbezeichnung: Verbund Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren (UMB) Teilprojekt D: Fe(II)/Fe(III)-Redoxreaktion auf atomarem Niveau in Smektiten		
Zuordnung zum FuE-Programm C2.3 Geotechnische und technische Barrieren C3.1 Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-)Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung		
Laufzeit des Vorhabens: 01.01.2021 bis 30.06.2025	Berichtszeitraum: 01.07.2024 bis 31.12.2024	
Gesamtkosten des Vorhabens: 339.641,00 EUR	Projektleiter: Dr. Sven Krüger	

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Vorhabensziele:

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

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

Das Untersuchungsprogramm umfasst folgende Arbeitspakete (AP):

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

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

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP 1: Modelle und Methoden; AP 2: Fe(II) in Smektiten; AP 3: Fe(II) an Oberflächen.

Zur Modellierung der Eisenreduktion an Kantenflächen wurde ein Schichtmodell der (010)-Kantenfläche eines transvakanten Smektit mit Wasserbedeckung aus dem Vorgängerprojekt erweitert (AP 1), um Vergleichbarkeit mit Festkörpermodellen im inneren des Schichtmodells zu erhalten. Optimierungen bestätigen diese Eigenschaft. Das Modell umfasst zwei verschiedene, durch die zufällige Struktur der Wasserschicht bedingte (010)-Oberflächen. Equilibrierungen ergaben terminierende SiOH und AlOH(H₂O)-Gruppen (CN = 6) und eine Al(OH)-Gruppe (CN = 5), die etwas stabiler als eine ideale Terminierung (CN(Al) = 6) ist. Mit weiteren dynamischen Rechnung soll die bevorzugte Terminierung der Oberfläche gefunden werden. Das Schichtmodell der Oberfläche zeigt eine minimale Relaxation bei idealer Terminierung und eine leichte Kontraktion (~1%) der Oberfläche mit unterkoordiniertem Al.

Die relative Stabilität von Substitutionen in Abhängigkeit vom Abstand von der (010)-Oberfläche wurde für oktaedrisches Fe(III), Fe(II) und Mg(II) berechnet (AP 3). Für Fe(II) wurde mit Ausnahme der unmittelbaren Oberflächenplätze zunächst seine Hochenergiekonfiguration erhalten. Für eine einzelne Fe(II)-Substitution konnte an allen Plätzen die Niederenergiekonfiguration gefunden werden. Rechnungen hierzu sind für Systeme mit einer Fe(II)- und einer Fe(III)-Substitution bereits teilweise erfolgreich fertiggestellt und werden fortgesetzt. Vorläufige Ergebnisse zeigen, dass der Einfluss der Oberfläche im Wesentlichen auf Plätze in der Oberfläche, die Oberflächengruppen tragen, beschränkt ist. Fe(III) und Mg(II) werden in der Oberfläche stabilisiert, Fe(II) jedoch geringfügiger. In der Umgebung eines unterkoordinierten Al-Ions an der Oberfläche ist auch eine Destabilisierung möglich. Die Störung des Gitters durch ein unterkoordiniertes Al-Ion erstreckt sich auch auf seine unmittelbare Umgebung. Diese Ergebnisse deuten darauf hin, dass das Redoxpotential von Eisen an der Oberfläche erniedrigt wird und der Oberflächeneffekt den Einfluss benachbarter geladener Substitutionen wohl nicht übersteigt. Für ein Modell mit zwei Fe(III)-Substitutionen zeigt sich, dass die Stabilisierung von Fe(III) an der Oberfläche die geringe Abstoßung benachbarter Fe(III)-Substitutionen überwiegt. Der gleiche Trend deutet sich für ein Modell mit einer Fe(III)- und einer Fe(II)-Substitution an, muss jedoch noch durch Bestimmung der Niederenergiekonfigurationen von Fe(II) bestätigt werden. Rechnungen zu einer (010)-Montmorillonitoberfläche mit einer Fe(II)-Substitution werden derzeit durchgeführt, um das Redoxpotential im Vergleich mit dem ungeladenen Pyrophyllitmodell abzuschätzen.

Um Gibbs-Energien zu approximieren (AP 1) wurden für transvakanten Montmorillonit mit Fe-Substitutionen Schwingungsmoden in der Einheitszelle berechnet und thermodynamische Korrekturen der elektronischen Energien bestimmt. Für Fe(III)- und Fe(II)-Substitutionen mit variablem Abstand zur Mg(II)-Substitution wurde eine Korrektur von ≈790 kJ/mol erhalten, die für verschiedene Substitutionsanordnungen nur um wenige kJ/mol variiert. Frustrierte Rotationsmoden der Einheitszelle als von der Zellwahl abhängige artifizielle Moden wurden vernachlässigt, was zu einer geringeren Variation der Korrektur führt. Variationen der Energie in Abhängigkeit vom Abstand der Substitutionen sinken marginal für Fe(III) und steigen etwas für Fe(II) durch die Korrekturen. Relative Redoxpotentiale aus Gibbs-Energien steigen etwas, die Verwendung lediglich elektronischer Energien stellt jedoch eine gute Approximation dar.

Derzeit wird ein größeres Smektitmodell mit einer 2×2×1-Einheitszelle vorbereitet (AP 1), um die Ladungsabhängigkeit der Eisenreduktion (AP 2) sowie ihre Abhängigkeit von der Art des Zwischenschichtions (AP 4) einer Untersuchung zugänglich zu machen. Für transvakanten Pyrophyllit und Montmorillonit wird wie erwartet eine vernachlässigbare Stabilisierung des Gitters (~5 kJ/mol pro 1×1×1-Einheitszelle) durch die Verdoppelung der Superzelle erhalten.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP 1: Modelle und Methoden; AP 2: Fe(II) in Smektiten; AP 3: Fe(II) an Oberflächen; AP 4: Zwischenschichtionen.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Vortrag: C. Muschielok, S. Krüger, *Iron in dioctahedral smectites: A quantum chemical computational view on distribution, stability and redox behavior*, Mid-European Clay Conference 2024, Pilsen, Tschechien, 15.-20. September 2024.

Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer: Leibniz Universität Hannover, Welfengarten 1, 30167 Hannover		Förderkennzeichen: 02 E 11870E
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren II – Phase II (UMB II), Teilprojekt E		
Zuordnung zum FuE-Programm: C2.3 Geotechnische und technische Barrieren		
Laufzeit des Vorhabens: 01.01.2021 bis 30.06.2025	Berichtszeitraum: 01.07.2024 bis 31.12.2024	
Gesamtkosten des Vorhabens: 331.363,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Renz	

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

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

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

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

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP1 & AP2: Die ersten Langzeitmessungen (36 Monate) wurden ausgewertet. Erste Ergebnisse weisen auf die Möglichkeit hin, dass sich an Bentonit-Eisen-Grenzflächen nach fortgeschrittener Korrosion ein Gleichgewichtszustand einstellt.
- AP3: Systemtheoretische Analyse des einstufigen Photodiodenverstärkers (PDVs) im Testbetrieb mit Testpuls. Stabilitätsanalyse des PDV-Verstärkerverhaltens in der Simulation und im Testbetrieb mit Testpuls. PDV-Schaltung wurde in Bezug auf SNR weiter optimiert und zeigt gute Ergebnisse im Testbetrieb mit Testpuls.

4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1 & AP2: Es sollen weitere Mößbauermessungen für die BGR, das HZDR sowie die Universität Greifwald aufgenommen und ausgewertet werden. Die letzten, im ursprünglichen Projektplan vorgesehenen Messungen sollen ausgewertet werden. Das Phänomen der unerwartet hohen Wasserstoffbildung soll weiter untersucht werden.
- AP3: Es wird eine Anforderungsanalyse bezüglich einer zweistufigen Verstärkerschaltung (PDV und Bandpass) erarbeitet. Es wurden gute Testpulsresultate erzielt, jedoch liefert der Betrieb im Endgerät (MIMOS II) keine gute Annahme, da der Schwellwert der Schaltungsreaktion noch zu hoch ist. MIMOS erzeugt zu kleine Ströme und muss weiter optimiert werden.

5. Berichte, Veröffentlichungen

- “Photo Diode Amplifier Design for Applications in MIMOS II for Space Exploration”, *Mohammad Beyki, Justus Pawlak, Robert Patzke, Franz Renz*, 2024 20th Conference on Synthesis, Modeling, Analysis and Simulation Methods and Applications to Circuit Design (SMACD), (2024).
- “Electronic Circuit Design for Radiation Signal Processing with Applications in Mössbauer Spectroscopy for Space Exploration”, *Mohammad Beyki, Justus Pawlak, Robert Patzke, Franz Renz*, 2024 IEEE 19th Conference on Industrial Electronics and Applications (ICIEA), (2024).
- “Practical Filter & Simulative Controller Design for Radiation Signal Processing with Applications in Mössbauer Spectroscopy for Space Exploration”, *Mohammad Beyki, Justus Pawlak, Robert Patzke, Franz Renz*, 2024 IEEE 10th International Conference on Control, Decision and Information Technologies (CoDIT), (2024).
- “Advanced Approaches in Mössbauer Drive Modelling and Controller Design Reducing System Order and Increasing Robustness”, *Mohammad Beyki, Justus Pawlak, Robert Patzke, Franz Renz*, 2024 IEEE 10th International Conference on Control, Decision and Information Technologies (CoDIT), (2024).
- “Drive Modeling and Dynamic Control in Mössbauer Spectroscopy for Space & Terrestrial Applications”, *Mohammad Beyki, Justus Pawlak, Robert Patzke, Franz Renz*, 2024 28th International Conference on Methods and Models in Automation and Robotics (MMAR), (2024).
- “Advanced Approaches in the Development of Transimpedance Amplifiers”, *T. Bartels, M. Beyki, J. Flemming*, et al., *Sensorik und Automation : Schriften des Forschungsinstituts ISA 2024*, HsH Applied Academics, 2024, 5406 KB, 127 pages, p. 35 – 49, SeriesInformation : Angewandte Forschung für die Welt von morgen
- “Simulative Drive Modeling and Enhancement of Classical Control Design in Mössbauer Spectroscopy for Short-Term Applications”, *T. Bartels, M. Beyki, J. Flemming*, et al., *Sensorik und Automation : Schriften des Forschungsinstituts ISA 2024*, HsH Applied Academics, 2024, 5406 KB, 127 pages, p. 73 – 90, SeriesInformation : Angewandte Forschung für die Welt von morgen

Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer: Institut für Erdsystemwissenschaften, Abteilung Bodenkunde, Leibniz Universität Hannover		Förderkennzeichen: 02 E 11870F
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt F		
Zuordnung zum FuE-Programm: C2.3 Geotechnische und technische Barrieren C3.1 Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-) Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung		
Laufzeit des Vorhabens: 01.01.2021 bis 30.06.2025	Berichtszeitraum: 01.07.2024 bis 31.12.2024	
Gesamtkosten des Vorhabens: 347.200,00 EUR	Projektleiter: PD Dr. Stefan Dultz	

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

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

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1: Die Quantifizierung von Fe-haltigen Schwermineralen in tomographischen Aufnahmen aus der von der GRS erhaltenen Reaktionszeitreihe zu zwei Bentoniten bei 120°C und 2 bar ergibt keine gerichteten Hinweise auf eine umfängliche Beteiligung von Schwermineralen an schnellen Versauerungsreaktionen. Es erscheint, dass das in den Smektiten lokalisierte Fe(II) deutlich reaktiver ist und nach Einstellung oxidativer Bedingungen in Gegenwart von Wasser kurzfristig zum Versauerungseffekt beiträgt. Für die tomographische *in situ* Untersuchung der mit der Versauerungsreaktion verbundenen Gasbläschenentstehung durch Freisetzung von CO₂ in verdichteten Bentoniten, wurde ein Antrag auf Messzeit an der röntgentomographischen Strahllinie der Synchrotroneinrichtung DESY in Hamburg gestellt und bewilligt.

AP2: Um den an die Fe-Freisetzung gebundenen potentiellen Versauerungsbeitrag von in den Bentoniten vorkommenden Tonmineralen und Schwermineralen vergleichend zu

bewerten, wurden diese getrennt in einem Berghof Druckaufschlusssystem bei 110°C in Oxidationsversuche eingesetzt. Es zeichnet sich eine kurzfristig hohe Reaktivität der in geringen Anteilen (<0,7 %) in den Bentoniten vorkommenden Schwermineralfraktion ab, in der hohe Anteile an Fe(II) vorliegen. Maßgeblicher für beobachtbare Versauerungsreaktionen erscheint jedoch die Oxidation von Fe(II) in Smektiten, wo bei geringem Reaktionsumfang die hohen Anteile in Bentoniten wirksam werden.

AP4: Vom HZDR wurden weitere Bentonitproben und zugehörige GGG40-Plättchen aus Mikrokosmenversuchen in der Zeitreihe nach 994 Tagen erhalten. Hier wurde korrosionsbedingte Abläufe durch Analyse des DCB-löslichen Fe, Al, Mn und Si extrahiert und am ICP-OES quantifiziert. Der Gehalt an Fe-Oxiden in den Bentoniten wird zum einen durch die Korrosion der Plättchen zum anderen durch Fe-Freisetzung aus Smektiten bedingt.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP1: Die Untersuchung der Mikromorphologie der Gasentwicklung in Bentoniten über *in situ* tomographische Aufnahmen bei stark verdichteten Bentoniten wird an der Elektronen-Synchrotron Einrichtung DESY in Hamburg im Umfang von 48 h im Zeitraum vom 31.3.-2.4.2025 durchgeführt. Ein eingereichter Antrag auf Messzeit wurde hier bewilligt. Für die Messungen werden Bentonitproben auf die für Bentonit-basiertes Versatzmaterial der geotechnischen Barrieren typische Trockendichte von 1,6 g/cm³ eingestellt. Da hier die Bildanalyse wegen der zu erwartenden geringen Porengrößen sehr anspruchsvoll ist werden zusätzlich die Verhältnisse in geringer verdichteten Bentoniten untersucht. Zahl, Größe und Zirkularität von Gasbläschen in der Zeitreihe bestimmt.

AP2: Die mineralogische Zusammensetzung der Schwerminerale soll durch Röntgenbeugungsanalyse der durch Dichtefraktionierung erhaltenen schweren Mineralfraktion bestimmt werden. Die Ergebnisse zur mineralogischen Zusammensetzung werden mit den Befunden von Dünnschliffaufnahmen und den Oxidationsversuchen zur Fe-Freisetzung verglichen. Die Erstellung eines Manuskriptes mit dem Titel: "Acidification and CO₂-degassing in bentonites triggered by oxidation of Fe(II)-containing minerals" soll abgeschlossen, eingereicht und als Grundlage für den zu erstellenden Abschlussbericht genutzt werden.

AP4: Aus der letzten zeitlich gestaffelten Versuchsreihe am HZDR werden Anfang Februar 2025 ca. 12 GGG40 Plättchen erhalten und in Rauigkeitsuntersuchungen zur Kennzeichnung der Mikromorphologie der Korrosion einbezogen. Zusätzlich werden die in die Versuche eingesetzten Bentonite, auch solche ohne Kontakt zu GGG40 Plättchen (zusammen ca. 25 Proben), bezüglich der Veränderung der Oberflächenladung und Matrixstabilität durch die Fe-Freisetzung aus Plättchen und Tonmineralen untersucht. Die in den Bentonitproben vorhandenen Mengen an gesamten Fe-Oxiden werden durch Extraktion mit DCB und anschließender Bestimmung von in Lösung gebrachtem Fe am ICP-OES bestimmt.

Aus der Dichtentrennung erhaltene leichte und schwere Mineralfraktion der Bentonite wird LUH-ACI Prof. Franz Renz (AP4) für Mössbauer-spektroskopische Untersuchungen zur Verfügung gestellt um die Interpretation der für die Bentonite erhaltenen Spektren zu verbessern.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Im Berichtszeitraum wurden Ergebnisse des Teilprojektes auf der Mid European Clay Conference in Pilsen im September 2024 in einem Vortrag und auf der Clay Conference in Hannover im November 2024 als Poster vorgestellt. Informative Abstracts wurden erstellt und publiziert. Die Beiträge hatten die Titel „Acidifying clays: Kinetics of Fe(II) oxidation and mineral contributions“ bzw. „Acidification and CO₂-degassing in bentonites triggered by oxidation of Fe(II)-containing minerals“.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 11880
Vorhabensbezeichnung: Sicherheitsrelevante Untersuchungen zur Bentonitaufsättigung (SIRUB)		
Zuordnung zum FuE-Programm: C2.3 Geotechnische und technische Barrieren C3.1 Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-) Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung		
Laufzeit des Vorhabens: 01.04.2021 bis 30.09.2025	Berichtszeitraum: 01.07.2024 bis 31.12.2024	
Gesamtkosten des Vorhabens: 1.468.292,50 EUR	Projektleiter: Dr. Klaus-Peter Kröhn	

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

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

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Zu AP1: Durch den Einsatz einer Linse vor der Spektrometersonde konnte der Beobachtungsabstand ausreichend vergrößert werden. Erste Messungen an gemahlene Bentonitproben mit unterschiedlichen Wassergehalten lieferten vielversprechende Ergebnisse. Spezielle Acrylglascheiben für die Beobachtungszelle wurden beschafft und erfolgreich auf Eignung getestet.

Zu AP2/AP3: Eine Beobachtungszelle wurde konstruiert und gebaut.

Zu AP 4: Die Arbeiten wurden abgeschlossen.

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

Zu AP6: Die geplante Messzelle wurde fertiggestellt. Nach erfolgreichen Tests zur Probenkompatibilität in der Zelle wurden Vorversuche zur Eignung unterschiedlicher Tracer durchgeführt. Der Tracer sollte dabei die Aufsättigung des Bentonits nicht beeinträchtigen und gleichzeitig in der Kluttreplika einen guten Kontrast für die visuelle Beobachtung aufweisen. Ergebnisse der ersten Versuche wurden auf der 9. Clay Conference vorgestellt.

Zusätzliche Arbeiten:

- Organisation und Durchführung eines internationalen Bentonitworkshops.
- Bentonitproben aus dem Prototype Repository wurden genommen, welche aus unterschiedlichen Entfernungen zu den Erhitzern stammen.
- Es wurde mit der Implementierung einer neuen 1D Randbedingung für geringe Wasserzuströme in das COMSOL-Viper Interface begonnen. Die Arbeiten wurden auf der diesjährigen COMSOL Conference vorgestellt und diskutiert.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Vergrößerung des Messabstands zwischen Spektrometersonde und Probe durch Linsensystem (AP1)
- Beginn der Aufsättigungsversuche (AP2 und AP3)
- Fortsetzung der Aufsättigungsversuche über Dampf und Wasser (AP5)
- Testen der Wiederholgenauigkeit und Aufnahme des geplanten Messprogramms (AP6)
- Messung von Adsorptions- und Desorptionsisothermen an den genommenen Bentonitproben
- Fertigstellung des COMSOL-Viper Interfaces

5. Berichte, Veröffentlichungen

Erste Ergebnisse der AP6 Versuche wurden auf der 9. Clay Conference präsentiert. Die Arbeiten an dem COMSOL-Viper Interface wurden auf der diesjährigen COMSOL Conference präsentiert.

Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer: BGE TECHNOLOGY GmbH		Förderkennzeichen: 02 E 11890A	
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Entwicklung und Test eines erweiterten Hoek-Brown Stoffmodells zur Berücksichtigung anisotropen Festigkeitsverhaltens bei der Anwendung der Integritätskriterien für kristalline Wirtsgesteine (BARIK), Teilprojekt A			
Zuordnung zum FuE-Programm: C3.1 Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-) Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung C3.3. Werkzeuge der Sicherheitsanalysen			
Laufzeit des Vorhabens: 01.03.2021 bis 31.01.2025		Berichtszeitraum: 01.07.2024 bis 31.12.2024	
Gesamtkosten des Vorhabens: 492.526,40 EUR		Projektleiter: R. Paola León Vargas	

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Das vorliegende Projekt zielt auf die Entwicklung und den Test eines erweiterten dreidimensionalen Hoek-Brown-Stoffmodells ab, das in der Lage ist, anisotropes Festigkeitsverhalten speziell in einem mit mehreren Klüften durchzogenen Gebirgskörper zu berücksichtigen. Es geht darum, die Grenzbedingung so zu formulieren, dass die festigkeitreduzierenden Eigenschaften des jeweiligen Kluftsystems im Zuge des Integritätsnachweises adäquat berücksichtigt werden können. Das BARIK-Stoffmodell soll in zwei verschiedenen Computercodes implementiert und getestet werden. Dadurch können Ungenauigkeiten, die durch die Verwendung unterschiedlicher Codes entstehen, identifiziert und bewertet werden. Mithilfe dieses neuen Stoffmodells soll geprüft werden, ob die aktuelle Formulierung und Quantifizierung des Dilatanz-Kriteriums für kristalline Wirtsgesteine ausreichend ist, oder ob Änderungen oder Konkretisierungen mit Blick auf die Berücksichtigung anisotroper Festigkeitsverhalten vorgenommen werden. Das BARIK-Modell soll auch für die Modellierung fluid-gesättigter Gebirgsbereiche eingesetzt werden. In diesem Fall wird der Biot-Koeffizient als hydromechanischer Kopplungsparameter eingeführt, um den effektiven Spannungszustand des geklüfteten Gesteins zu ermitteln. Die Durchführung des Projektes erfolgt in enger Zusammenarbeit mit der Technischen Universität Bergakademie Freiberg.

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

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

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

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im Rahmen der Arbeitspakete AP3 und AP4 wurden während des Berichtszeitraums ergänzende Validierungsberechnungen durchgeführt, bei denen zwei Benchmark-Modelle mit drei Trennflächensystemen als Referenz dienten. Ziel war es, das in BARIK implementierte Stoffmodell zu validieren und insbesondere die korrekte Modellierung der Trennflächensysteme zu überprüfen. Der Vergleich der Berechnungsergebnisse des BARIK-Ansatzes mit den Benchmark-Daten zeigt eine hohe Übereinstimmung und bestätigt die erfolgreiche Implementierung des Stoffmodells in FLAC3D und OGS.

Die hydromechanische Kopplung mit variablen Biot-Koeffizienten wurde in beiden Codes implementiert und erfolgreich getestet (Single Element Test). Sie ist essentiell für die Modellierung geklüfteter Kristallingesteine, da sie den Einfluss des Porendrucks auf den Spannungszustand erfasst. Änderungen im Porenwasserdruck können Spannungen erzeugen und Rissbildungen im Gestein begünstigen.

Im AP5 wurde die Dokumentation der Verifizierungs- und Validierungsrechnungen für das BARIK-Stoffmodell unter Verwendung von FLAC3D und OGS fortgeführt. Ziel dieser Dokumentation ist es, die Ergebnisse der Verifizierung und Validierung der korrekten Implementierung des BARIK-Stoffmodells systematisch festzuhalten.

4. Geplante Weiterarbeiten

Validierung der hydromechanischen Kopplung: Bisher lag der Fokus der Verifizierung und Validierung des Stoffmodells auf mechanischen Aspekten. Nun wird die hydromechanische Kopplung integriert, um den Einfluss des Porendrucks auf die effektiven Spannungen im Gebirge zu berücksichtigen. Kleinmaßstäbliche Modelle werden verwendet, um die Gleichungsimplementierung in FLAC3D und OGS zu überprüfen.

Finalisierung des Abschlussberichts: Der Bericht fasst die Projektergebnisse strukturiert zusammen und enthält einen technischen Anhang mit Laborergebnissen, Verifizierungs- und Validierungsdaten, Modellparametern sowie Benchmark-Vergleichen zwischen FLAC3D, OGS und 3DEC.

Ergebnisdiskussion mit der BGR: In einem Online-Workshop mit der BGR werden die gewonnenen Erkenntnisse aus dem FuE-Projekt BARIK präsentiert und diskutiert.

5. Berichte, Veröffentlichungen

León Vargas, R. P.; Friedel, M.; Gerasimov, T.; Hassanzadegan, A.; Konietzky, H.; Rahmig, M.; Weber, F. (2024): Implementation and test of an extended Hoek-Brown-based anisotropic constitutive model for fractured crystalline rock. In: H. Konietzky (Hrsg.) 53. Geomechanik-Kolloquium, 15. November 2024. Freiberg: TU Freiberg. S. 117 – 134 (Konferenzpaper und Vortrag)

Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer: Technische Universität Bergakademie Freiberg		Förderkennzeichen: 02 E 11890B
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Entwicklung und Test eines erweiterten Hoek-Brown Stoffmodells zur Berücksichtigung anisotropen Festigkeitsverhaltens bei der Anwendung der Integritätskriterien für kristalline Wirtsgesteine (BARIK), Teilprojekt B		
Zuordnung zum FuE-Programm: C3.1 Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-) Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung C3.3 Werkzeuge der Sicherheitsanalysen		
Laufzeit des Vorhabens: 01.03.2021 bis 31.01.2025		Berichtszeitraum: 01.07.2024 bis 31.12.2024
Gesamtkosten des Vorhabens: 382.918,55 EUR		Projektleiter: Prof. Dr.-Ing. habil. Heinz Konietzky

1. Vorhabensziele

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 inhomogenen Permeabilitätsentwicklung als Funktion der Schädigung inkl. einer Aktualisierung des Biot-Koeffizienten. Die Validierung des Stoffgesetzes erfolgt an diversen Laborversuchen. Die Anwendung konzentriert sich auf die Nutzung als Dilatanzkriterium für Sicherheitsuntersuchungen im Endlagerbereich.

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

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

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

AP 1 – Entwicklung Stoffmodell:

- Entwicklung eines nichtlinearen elasto-plastischen Stoffgesetzes auf Basis 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 inhomogenen Permeabilitätsentwicklung auf Basis der mechanischen Schädigungsentwicklung.

AP 2 – Laborversuche:

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

AP 3 - Implementierung und Test:

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

AP 4 – Evaluierung:

- Evaluierung des Stoffgesetzes beim Einsatz als Dilatanzkriterium.

AP 5 – Dokumentation:

- Zwischenzeitliche und abschließende Dokumentation aller Entwicklungen und Arbeiten sowie Datensicherung

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Verifizierungsrechnungen des BARIK-Stoffgesetzes im Vergleich zum FLAC3D built-in COMBA-Modell bzgl. des Schwächeflächenversagens und des implementierten Strain-Softening-Verhaltens für bis zu drei Schwächeflächen. Debugging des BARIK-Stoffgesetzes zum Schwächeflächenversagen und -Softening. Tiefgreifende Analyse der Verifizierungsergebnisse, da programmtechnische Fehler im built-in COMBA-Modell erkannt wurden. Ideenfindung zur Erstellung eines Bug-Reports für Itasca. Übertragung des Stoffgesetz in FLAC3D9. Bereitstellung von aktualisierten .dll-Dateien für Projektpartner. Implementierung und Verifizierung eines deformationsabhängigen Biot-Koeffizienten für hydro-mechanisch gekoppelte Simulationen. Beginn der Dokumentation der theoretischen Ansätze, der Verwendung des Stoffgesetzes in FLAC3D und der Verifizierungsrechnungen als Abschlussbericht. Übertragung des Stoffgesetzes in 3DEC. Durchführen von Testrechnungen an Würfelmodellen zur Verwendung des BARIK-Stoffgesetzes in 3DEC.

Abschluss der hydromechanischen Triaxialversuche und der Einaxialen Druckversuche an Prüfkörpern mit künstlich hergestellten Schwächeflächen zur Untersuchung des Bruchverhaltens unter verschiedenen Ausrichtungen. Auswertung der Versuche und Erstellung eines Ergebnisberichtes über den Umfang und die Ergebnisse der durchgeführten Versuche zur Abrundung des Parametersatzes des anisotropen Gesteins Freiburger Gneis für den Abschlussbericht.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Erweiterung und Finalisierung der Dokumentation/ des Abschlussberichts zum BARIK-Stoffgesetz (Einarbeitung der Vergleichsrechnungen zwischen FLAC3D und 3DEC) und den Ergebnissen der Laborversuche

5. Berichte, Veröffentlichungen

Veröffentlichung:

R. P. León Vargas, M. Friedel, T. Gerasimov, A. Hassanzadegan, H. Konietzky, F. Weber (2024). Implementation and test of an extended Hoek-Brown-based anisotropic constitutive model for fractured crystalline rock. In H. Konietzky (Hrsg.), 53. Geomechanik-Kolloquium. Freiberg.

Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer: Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf (HZDR), Bautzner Landstr. 400, 01328 Dresden		Förderkennzeichen: 02 E 11911A
Vorhabensbezeichnung: Vorhersage der heterogenen Radionuklidsorption auf Kluft- und Störungsflächen in granitischen Gesteinen: Parametrisierung und Validierung verbesserter reaktiver Transportmodelle (WTZ-Granit), Teilprojekt A		
Zuordnung zum FuE-Programm: C2.3 Geotechnische und technische Barrieren		
Laufzeit des Vorhabens: 01.04.2021 bis 30.11.2024	Berichtszeitraum: 01.07.2024 bis 30.11.2024	
Gesamtkosten des Vorhabens: 253.632,00 EUR	Projektleiter: Cornelius Fischer	

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

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

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

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

AP 4: Nachwuchsförderung und internationaler Austausch

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Das eingereichte Manuskript zur Quantifizierung der Fließratendifferenzen und Fließratenbeschleunigungen aus Simulationsrechnungen, welches auf den bisherigen numerischen Arbeiten zur Transportheterogenität auf Klufflächen im Granit von Soultz-sous-Forêts basiert, wurde revidiert.

Die Arbeiten an Datensätzen zur Oberflächenreaktivität bei Kristallauflösung (Materialanalog für Kluffüllungen), unter Verwendung des *power spectral density*- (PSD-) Ansatzes und der Ratenpektrenanalyse wurden abgeschlossen. Ein Manuskript wurde dazu erarbeitet.

Simulationsrechnungen auf den Klufformen von Kristallingesteins-Kernproben wurden abgeschlossen. Die Vergleiche der Transportmodellierungen mit den PET-Datensätzen bzgl. der hydrodynamischen Parameter wurden abgeschlossen. Quantitative Unterschiede der Fließmuster in den unterschiedlich mineralisierten Klüften wurden analysiert und mechanistische Schlussfolgerungen gezogen.

4. Geplante Weiterarbeiten

Arbeiten sind abgeschlossen, drittes Manuskript wird noch eingereicht.

5. Berichte, Veröffentlichungen

C Fischer (2024): Flow field analysis based on positron emission tomography (PET), Nuklearchemie 2024, Jahrestagung der Fachgruppe Nuklearchemie (5-7 Nov. 2024), Karlsruhe (**Vortrag**)

Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer: Friedrich-Schiller-Universität Jena, Fürstengraben 1, 07743 Jena		Förderkennzeichen: 02 E 11911B
Vorhabensbezeichnung: Vorhersage der heterogenen Radionuklidsorption auf Kluft- und Störungsflächen in granitischen Gesteinen: Parametrisierung und Validierung verbesserter reaktiver Transportmodelle (WTZ-Granit), Teilprojekt B		
Zuordnung zum FuE-Programm: C2.3 Geotechnische und technische Barrieren		
Laufzeit des Vorhabens: 01.04.2021 bis 31.11.2024	Berichtszeitraum: 01.07.2024 bis 30.11.2024	
Gesamtkosten des Vorhabens: 249.905,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Thorsten Schäfer	

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

- AP 1: Mineralogisch-geochemische und oberflächenanalytische Charakterisierung der Kluft- und Störungsoberflächen
- AP 2: Heterogene Oberflächenreaktivität: Experimentelle und numerische Untersuchungen zur Sorptionseffizienz
- AP 3: Parametrisierung und Validierung der reaktiven Transportmodelle, basierend auf experimenteller Analyse des Transportverhaltens und der Oberflächenreaktivität
- AP 4: Nachwuchsförderung und internationaler Austausch

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP 1: Die geochemische Signatur der sekundären Karbonate des Bohrkerns BZXII (38.8 m) aus dem Bukov URL wurden mittels LA-ICP-MS bestimmt. Anhand von Clusteranalysen konnten 5 Präzipitationsevents differenziert werden. Mittels REM-EBSD-Messungen (Kooperation mit der Bauhaus-Universität Weimar) und REM-Kathodolumineszenzmessungen (Projektpartner HZDR Leipzig) sowie anschließender LA-ICP-MS wurde an ausgewählten Proben untersucht, in wie weit die Inkorporation der Spurenelemente durch Präzipitationsgeschwindigkeit, Ausgangslösung oder mineralflächenspezifischer Inkorporation gesteuert ist. Dabei konnte für diese Proben gezeigt werden, dass die Mineralflächenspezifische Inkorporation eine untergeordnete Rolle spielt.

AP 3: Im Rahmen eines Forschungsaufenthaltes an der Universität Poitiers (Dr. Paul Sardini, POSINAM Laboratoire) wurden mittels Autoradiographie die verbundene Porosität an ausgewählten Proben des Lausitzer Granitkomplexes bestimmt. Hierbei wurde ebenfalls der Austausch über Methoden der Bildanalyse forciert. Mithilfe von Überlagerung von mineralogischen Karten und Porositätsverteilung wurden mineralpezifische Porositäten zugeordnet.

AP 4: Im Bearbeitungszeitraum wurde hauptsächlich die Datenauswertung und die Niederschrift der Ergebnisse vorangetrieben.

4. Geplante Weiterarbeiten

-

5. Berichte, Veröffentlichungen

Kusturica A, Pirrung M, Hupfer S, Fischer C, Schäfer T (to be submitted): Pore space increase in response to different alteration stages of granitoid rocks based on combined μ CT/XRM and geochemical/mineralogical analysis. *Int. J. Rock Mech. Min. Sci.*

Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer: Forschungszentrum Jülich GmbH, Institut of Fusion Energy – Nukleare Entsorgung und Reaktorsicherheit (IFN-2)		Förderkennzeichen: 02 E 11921A
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Untersuchungen zur SEParation von AMeridium aus hochradioaktiven Abfalllösungen (SEPAM), Teilprojekt A		
Zuordnung zum FuE-Programm: C2.1 Sicherheits- und Endlagerkonzepte B3 Behandlungs- und Entsorgungsmethoden		
Laufzeit des Vorhabens: 01.04.2021 bis 30.09.2024	Berichtszeitraum: 01.07.2024 bis 30.09.2024	
Gesamtkosten des Vorhabens: 254.678,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Giuseppe Modolo	

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

Das Projekt wird in vier Arbeitspaketen bearbeitet:

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

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Arbeitspaket 1:

Es wurden zwei hydrophile Analoga von ADAAM, einem in Japan entwickelten lipophilen Extraktionsmittel¹, in Zusammenarbeit mit der Universität Twente in den Niederlanden getestet. Die Liganden wurden in verschiedenen Salpetersäurekonzentrationen gelöst und mit TODGA in Dodekan getestet. Die Ergebnisse zeigten allerdings keine selektive Komplexierung von dreiwertigen Actiniden und stellten sich damit als wenig geeignet dar.

Arbeitspaket 2:

Die vorliegende Arbeit widmet sich der Fortsetzung der Stabilitätsstudie zur Hydrolyse von BTP-(COOH)₈. Die letzten beiden Tests wurden nach einer Versuchsdauer von neun Monaten und einem Jahr durchgeführt. Nach einem Jahr wurde ein marginaler Anstieg der An(III)-Verteilungsverhältnisse gefunden, was auf eine potenzielle Degradation des Liganden oder eine Beeinflussung des Abbauprozesses durch die Nitratkonzentration hindeuten könnte. Insgesamt stellte sich der BTP-(COOH)₈ Ligand als sehr stabil gegenüber Salpetersäure heraus. Aufgrund dessen und wegen seiner hohen Selektivität für dreiwertige Actiniden ist BTP-(COOH)₈ gut für eine Anwendung geeignet.

Arbeitspaket 3:

Die Experimente zur Kinetik und thermischen Abhängigkeit sind abgeschlossen.

Arbeitspaket 4:

Die Doktorandin hat eine neue wissenschaftliche Publikation fertiggestellt, die zur Veröffentlichung eingereicht ist.

4. Geplante Weiterarbeiten

Veröffentlichung der Abschlussarbeit von BTP-(COOH)₈ und der Doktorarbeit.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Laura Diaz Gomez, Andreas Wilden, Patrick Weßling, Giuseppe Modolo. FZJ contribution to the SEPAM project. Final SEPAM Project meeting. 19.09.2024. Online.

Laura Diaz Gomez, Patrik Weßling, Andreas Wilden, Petra Panak, Gregory P. Horne, Stephen P. Mezyk, Julie R. Peller, Andreas Geist, Giuseppe Modolo. Extraction, characterization and stability studies of Bistriazinyl-derived carboxylic acids. Inorganic Chemistry, eingereicht

Referenz

Y. Sasaki, M. Kaneko, Y. Ban and H. Suzuki, Journal of Nuclear Science and Technology, 2023, DOI:10.1080/00223131.2023.2283214.

Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer: Karlsruher Institut für Technologie (Großforschungsaufgabe)		Förderkennzeichen: 02 E 11921B	
Vorhabensbezeichnung: Untersuchungen zur SEParation von AMericiem aus hochradioaktiven Abfalllösungen (SEPAM) Teilprojekt B: Thermodynamische Daten und Spektroskopische Untersuchungen			
Zuordnung zum FuE-Programm: C2.1 Sicherheits- und Endlagerkonzepte B3 Behandlungs- und Entsorgungsmethoden			
Laufzeit des Vorhabens: 01.04.2021 bis 30.09.2024		Berichtszeitraum: 01.07.2024 bis 30.09.2024	
Gesamtkosten des Vorhabens: 250.000,00 EUR		Projektleiter: Andreas Geist	

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

Arbeitspaket 1:
Grundlagen Koordinations- und Extraktionschemie

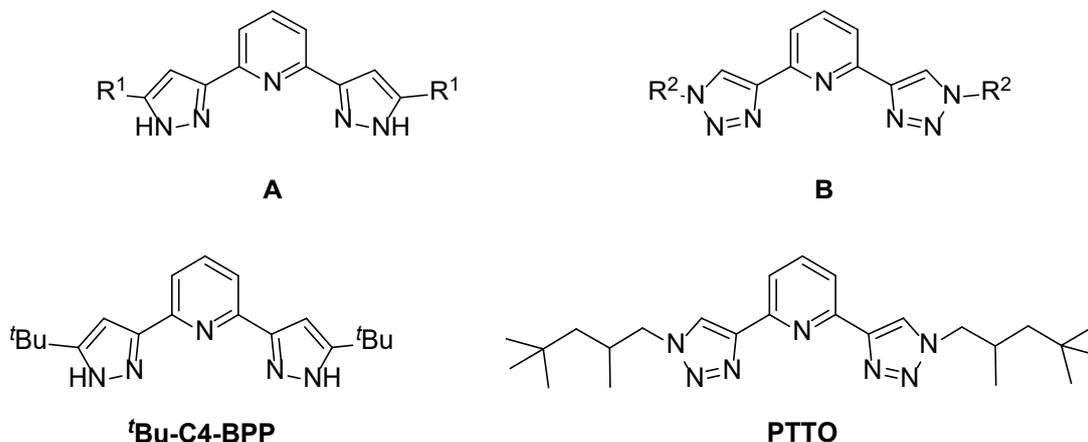
Arbeitspaket 2:
Prozessrelevante Optimierungen

Arbeitspaket 3:
Modellierung und Prozesstests

Arbeitspaket 4:
Nachwuchsförderung

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Für die Komplexierung von Actinid- und Lanthanidionen mit *N*-Donorliganden nach dem CHON-Prinzip lag der Fokus auf Bis-Pyrazolyl-pyridinen **A** und 1,2,3-Triazol-pyridinen **B**. Ziel ist es, den Einfluss der Anzahl und Position der Stickstoffatome im aromatischen Fünfring auf die Komplexierung von Actinid- und Lanthanidionen zu untersuchen.



Die Komplexierung von La(III), Sm(III) und Lu(III) mit PTTO wurde mittels TRLFS und NMR untersucht. Titrationsexperimente mit La(III) und Sm(III) zeigten mit stetiger Erhöhung der PTTO-Konzentration die Bildung der 1:1-, 1:2- und 1:3-Komplexe, wobei die Sm(III)-Komplexe bei geringeren PTTO-Konzentrationen auftraten als die entsprechenden La(III)-Komplexe. Für Lu(III) war fast ausschließlich der 1:3-Komplex zu beobachten; lediglich bei sehr geringen PTTO-Konzentrationen zeigte sich der 1:1-Komplex. Hieraus zeigt sich ein direkter Zusammenhang zwischen der Stabilität der jeweiligen Komplexe und dem Ionenradius entlang der Reihe der Lanthanide.

Die 1:3-Komplexe wurden anhand von 1D- und 2D-Methoden charakterisiert. Wie bereits bei tBu-C4-BPP beobachtet, zeigt der La(III)-Komplex eine erhebliche Linienverbreiterungen der Signale. Dies kann auf einen Austausch zwischen freiem und komplexiertem PTTO zurückgeführt werden. Dadurch konnten für den La(III)-Komplex keine ¹⁵N-Verschiebungen bestimmt werden. Für den entsprechenden Sm(III)-Komplex konnten lediglich die nicht-kordinierenden Stickstoffatome beobachtet werden. Nur am Lu(III)-Komplex wurden alle vier Stickstoffatome beobachtet.

Nach Abschluss der Arbeiten an den Lanthaniden als Referenz wurden die Am(III)-Komplexe hergestellt und untersucht. Im Gegensatz zu tBu-C4-BPP, bei dem sich 1:1-, 1:2- und 1:3-Komplexe bilden, wurde hier nur der 1:3-Komplex [Am(PTTO)₃]³⁺ beobachtet. Dieser Komplex zeigt signifikante Hochfeldverschiebungen der koordinierenden Stickstoffatome. Dies zeigt den höheren Kovalenten Anteil der Am(III)-*N*-Bindung im Vergleich zur Ln(III)-*N*-Bindung.

4. Geplante Weiterarbeiten

Keine.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Stracke, J.; Weßling, P.; Sittel, T.; Meiners, P.; Geist, A.; Panak, P. J., Extraction and complexation studies with 2,6-bis(5-(tert-butyl)-1H-pyrazol-3-yl)pyridine in the presence of 2-bromohexanoic acid. *RSC Advances* **2024**, *14* (39), 28415–28422.

Stracke, J., Weßling, P., Sittel T., Geist A., Panak P. J., Spectroscopic study of the complexation of An(III) and Ln(III) with C4-BPP. 10th International Conference on Nuclear and Radiochemistry – NRC10, Brighton (UK), 25.–30. August 2024 (Vortrag).

Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer: Rheinisch-Westfälische Technische Hochschule Aachen		Förderkennzeichen: 02 E 11931
Vorhabensbezeichnung: Einfluss der thermischen Reife auf die gekoppelten hydro-mechanischen Eigenschaften niedrig-durchlässiger Tonsteine – Feld & Laborskala (Maturity)		
Zuordnung zum FuE-Programm: C1.1 Geowissenschaftliche und geotechnische Methoden zur Standorterkundung (Feld und Labor) C1.2 Charakterisierung des Geosystems und Geosynthese		
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2021 bis 31.05.2026		Berichtszeitraum: 01.07.2024 bis 31.12.2024
Gesamtkosten des Vorhabens: 1.299.689,00 EUR		Projektleiter: Prof. Dr. Florian Amann

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Ziel des Projekts ist die Untersuchung der Abhängigkeit der petrophysikalischen und gesteinsmechanischen Eigenschaften von Tonsteinen von ihrer geologischen Versenkungsgeschichte, d. h. von der maximalen Versenkungstiefe, und den damit verbundenen, erheblichen Änderungen der maximal erreichten Drücke und Temperaturen. Dies ist erforderlich, um die Integrität potenzieller Tonsteinformationen im tiefen Untergrund und ihre Entwicklung über einen Zeitraum von 1 Million Jahren zu beurteilen. Gut geeignet für dieses Projekt sind die Tonsteine des Pliensbachiums (Unterjura), die in 8 Forschungsbohrungen entlang der Hilsmulde (ca. 50 km südlich von Hannover) in-situ vermessen und an Bohrkernen beprobt werden sollen. Das Gebiet zeichnet sich durch eine relativ 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, in-situ hydraulischen 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

Weitere Messungen zur Mineralogie und Petrographie/Geochemie (insb. Vitritreflektion, RockEval Pyrolyse) wurden durchgeführt, um die statistische Belastbarkeit der Daten zu erhöhen.

Die Messungen zur hydraulischen Konduktivität in Abhängigkeit der effektiven Spannung (5 MPa → 10 MPa → 20 MPa → 10 MPa → 5 MPa; stationärer Fluss mit Wasser) sowie zu den Kapillardrücken (Sperrdruckversuche mit Wasserstoff an vollständig wassergesättigten Prüfkörpern) wurden fortgesetzt. Darüber hinaus wurden Gasaufnahmemessungen ohne Umgebungsdruck durchgeführt, bei denen neben Helium auch weitere Gase wie Methan, Stickstoff und Argon verwendet wurden. Diese Ergebnisse wurden hinsichtlich der Permeabilität und fluiddynamischer Effekte verglichen. Erste Korrelationen zwischen Porosität, Porenradienverteilung, Kationenaustauschkapazität, und thermischer Reife wurden herausgearbeitet.

Es wurden erneut einige Messungen der einaxialen Druckfestigkeit an Proben mit definierten Sättigungsgraden durchgeführt, um die Datendichte zu erhöhen. Die Testserie der triaxialen Druckversuche wurde weitergeführt. Außerdem wurde an jeweiligen Zwillingsproben der Triaxial-Proben die Porosität gemessen.

Die mineralogischen Untersuchungen wurden auf die Tonfraktion kleiner 2 µm ausgeweitet und noch fehlende XRF-Messungen wurden durchgeführt, so dass die mineralogische und geochemische Charakterisierung der unterschiedlichen Bohrung damit komplementiert wurde. Zudem wurde die Kationenaustauschkapazität für alle fünf Bohrlokationen an jeweils ca. 10 Proben bestimmt.

Die Loggingdaten wurden hinsichtlich verschiedener Gesteinsparameter, wie z.B. Porosität und Dichte, analysiert. Die Ergebnisse wurden einem Vergleich mit den entsprechenden Labordaten unterzogen und erste Korrelationen abgeleitet.

Eine Analyse der Daten aus der ersten hydrogeologischen Feldkampagne wurde abgeschlossen und hydraulische Leitfähigkeiten für die Bohrlokationen BO1 und BO3 wurden ermittelt. Es wurden weitere hydraulische Tests an beiden Lokationen durchgeführt. Entsprechende Versuche an Lokation BO5 verzögern sich durch technische Schwierigkeiten, sind jedoch für das erste Quartal 2025 geplant.

4. Geplante Weiterarbeiten

In den folgenden Monaten werden die petrophysikalischen und geomechanischen Messungen an allen Bohrkernen fortgeführt. Weitere hydraulische Bohrlochversuche zur Ermittlung der in-situ Permeabilität sind für 2025 geplant.

Mit der Vervollständigung der petrophysikalischen und geomechanischen Daten können zudem erste Korrelationen zwischen physikalischen Gesteinseigenschaften und thermischer Reife herausgearbeitet werden.

5. Berichte, Veröffentlichungen

- Burnaz L., Littke R., Erbacher J., Strauss H., Grohmann S., Amann F. (2024). Lower Jurassic (Pliensbachian-Toarcian) marine paleoenvironment in western Europe: Sedimentology, geochemistry and organic petrology of the wells Mainzholzen and Wickensen, Hils Syncline, Lower Saxony Basin. *International Journal of Earth Sciences*, 1-24.
- Castro-Vera L., Amberg S., Gaus G., Leu K. and Littke R. (2024). 3D basin modeling of the Hils Syncline, Germany: reconstruction of burial and thermal history and implications for petrophysical properties of potential Mesozoic shale host rocks for nuclear waste storage. *International Journal of Earth Sciences*, 1-32.
- Burchartz, R., Jalali, M., Grohmann, S., Winhausen, L., Gaus, G., Seemann, T., Erbacher, J., Littke, R., and Amann, F.: The Influence of Burial History on the In-situ Petrophysical and Mechanical Characteristics of Pliensbachian Shale, EGU General Assembly 2024, Vienna, Austria, 14–19 Apr 2024, EGU24-16083, <https://doi.org/10.5194/egusphere-egu24-16083>, 2024.

- Castro-Vera, L., Amberg, S., Gaus, G., Leu, K., Littke, R.: 3D basin modeling of the Hills Syncline, Germany: reconstruction of burial and thermal history and implications for petrophysical properties of potential Mesozoic shale host rocks for nuclear waste storage, Tage der Standortauswahl 2024, Goslar.
- Gaus, G., Seemann, T., Burchartz, R., Winhausen, L., Amann, F., and Littke, R.: Kompositionelle und petrophysikalische Charakterisierung von Tonsteinen in Abhängigkeit der thermischen Reife: Experimentelle Untersuchungen am Amaltheenton, Niedersachsen, Tage der Standortauswahl 2024, Goslar.
- Burchartz, R., Jalali, M., Winhausen, L., Gaus, G., Grohmann, S., Seemann, T., Erbacher, J., Littke, R., Amann, F.: Petrophysikalische und hydrogeologische in-situ Charakterisierung des Amaltheentons in Abhängigkeit der Versenkungs- und Temperaturgeschichte, Tage der Standortauswahl 2024, Goslar.
- Winhausen, L., Luna, I., Burchartz, R., Jalali, M., Seemann, T., Gaus, G., Littke, R., Amann, F.: Der Einfluss der Versenkungsgeschichte und Sättigung auf die geomechanischen Eigenschaften von Tonsteinen, Tage der Standortauswahl 2024, Goslar.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 11941
Vorhabensbezeichnung: Wissenschaftliche Grundlagen zum Nachweis der Langzeitsicherheit von Endlagern - WiGru-9		
Zuordnung zum FuE-Programm: C3.1 Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-) Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung C3.2 Methodische Grundlagen der Nachweisführung		
Laufzeit des Vorhabens: 01.05.2021 bis 30.09.2024	Berichtszeitraum: 01.07.2024 bis 30.09.2024	
Gesamtkosten des Vorhabens: 2.250.056,65 EUR	Projektleiter: Dr. U. Noseck	

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Im Rahmen des Vorhabens werden die internationalen Entwicklungen zu Strategien und methodischen Vorgehensweisen bei einem Safety Case durch Mitarbeit in internationalen Arbeitsgruppen mitgestaltet und die Ergebnisse im Hinblick auf ihre Bedeutung für das deutsche Standortauswahlverfahren ausgewertet. Die Ergebnisse können zudem Ausgangspunkt weiterer nationaler Forschungsvorhaben sein bzw. in bereits laufende nationale Forschungsvorhaben einfließen.

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

TA 1: Bearbeitung grundlegender Aspekte

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

TA 2: Bearbeitung von Schwerpunktthemen

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

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- TA 1:
- Organisation und Leitung eines IGSC Core Group Treffens und weiterer Treffen des Programm-Komitees für das Safety Case Symposium 2024. Durchführung von Reviews für eingereichte Beiträge. Teilnahme an der Arbeitsgruppe GeneSiS mit Erstellung eines Papers für das IGSC-Symposium über die Ergebnisse aus den Interviews mit SKB, Nagra, Posiva und Andra zur Entwicklung des Safety Case vom generischen zum standortspezifischen Stadium.
 - Teilnahme an den Sitzungen des EGAR-Bureaus, Erstellung eines Papers und Vortrags über den Set of Essential Records (SER) für das IGSC Safety Case Symposium. Überarbeitung des SER-Berichts nach Review durch die EGAR-Arbeitsgruppe und einen Vertreter der NEA.
 - Überarbeitung des Fragebogens für die CRC-Mitglieder zum Themengebiet „Software und Parameter“; Review der Einträge in der Online-Literaturdatenbank zu geochemischen Bedingungen im Kristallin inkl. Arbeitstreffen.
 - Fertigstellung des State-of-the-Art-Reports des Salt Clubs zu “Development of scenarios for repositories for radioactive waste in salt formations”; Übergabe des Dokuments an die NEA.
- TA 2:
- Weiterführung der Analyse von Modellsystemen verschiedener Länder im Rahmen der gemeinsamen Aktivität zur Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse (JOSA).
 - Optimierung der Versuchsführung bei den Einfrierversuchen. Vorbereitung eines diesbezüglichen CatchNet Seminarvortrags.
 - Verteilung der Beschreibung von Task 14a der Task Force on EBS an die TF-Mitglieder und Vorstellung auf dem September Meeting in Hannover.

4. Geplante Weiterarbeiten

Keine, das Projekt endete am 30.09.2024.

5. Berichte, Veröffentlichungen

U. Noseck et al.: Scientific Basis for a Safety Case of Deep Geological Repositories. Final report. GRS-771, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Januar 2025.

Frank, T., Becker, D.A., Benbow, S., Bond, A., Jayne, R., LaForce, T., Wolf, J.: Value of abstraction in performance assessment – When is a higher level of detail necessary? *GeoMech. Engin. Env.* 39, 100577 (2024). <https://doi.org/10.1016/j.gete.2024.100577>.

LaForce, T., Bartol, J., Becker, D.A., Benbow, S., Bond, A., Dietl, C.R., Frank, T., Kock, I., Magri, F., Nicholas, J., Jayne, R., Pekala, M., Stauffer, P.H., Stein, E., Stone, J., Wolf, J.: Comparing modelling approaches for a generic nuclear waste repository in salt. *GeoMech. Energy. Eny.* 40, 100621 (2024). <https://doi.org/10.1016/j.gete.2024.100621>.

OECD/NEA: Development of scenarios for repositories for radioactive waste in salt formations. A State-of-the-art-report for the NEA Salt Club. in Vorbereitung, 2025.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 11981A
Vorhabensbezeichnung: Implementierung eines Monitoringsystems zur Evaluierung der Korrosionsvorgänge an Behältermaterialien in Bentonit-basierten Endlagerkonzepten (IMKORB), Teilprojekt A		
Zuordnung zum FuE-Programm: C2.3 Geotechnische und technische Barrieren C2.4 Monitoring		
Laufzeit des Vorhabens: 01.08.2021 bis 30.09.2026	Berichtszeitraum: 01.07.2024 bis 31.12.2024	
Gesamtkosten des Vorhabens: 972.561,50 EUR	Projektleiter: PD Dr. habil. Andrés G. Muñoz	

1. Vorhabenziele / Bezug zu anderen Vorhaben

In diesem 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 innovative Laboruntersuchungen mit Blick auf die Vorbereitung von Feldexperimenten in einem Bohrloch am Grimsel-Felslabor beinhaltet.

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

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

Im Einzelnen werden folgende Teilziele verfolgt

- AP 1 Entwicklung der elektrochemischen Sensorik zur Anwendung in In-Situ-Experimenten.
- AP 1.1 Elektrochemische Untersuchungen der Korrosion an der Metall-Porenwasser Grenzfläche.
- AP 1.2 Monitoring der Grenzflächenparameter in Langzeit-Laborexperimenten

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Elektrochemische Untersuchungen (AP 1.1)

Einige elektrochemische Experimente zur Korrosion von Kugelgraphitstahl (GGG40) in Opalinuston-Wasser unter hohen hydrostatischen Drücken wurden unter optimierten technischen Messeinstellungen wiederholt. Die dazu gehörigen und vom Projektpartner gelieferten Oberflächenanalysen (REM-EDX, XPS) der korrodierten Proben wurden ausgewertet und anhand der elektrochemischen Ergebnisse und eines aktualisierten Literaturüberblicks interpretiert. Die aus dieser Analyse gewonnenen Erkenntnisse wurden auf ein Manuskript für einen Fachartikel zusammengestellt.

Ebenfalls wurden die Mikroskopie- Metallographie- und Spektroskopie-Ergebnisse der Experimente zur Korrosion von Kugelgraphitstahl in gesättigtem Wyoming-Bentonit unter γ -Strahlung ausgewertet und mithilfe einer Literaturrevision interpretiert und in ein Manuskript für einen Fachartikel zusammengestellt.

Monitoring der Grenzflächenparameter in Langzeit-Laborexperimenten (AP 1.2)

Die Mikroskopie- und Oberflächenspektroskopie-Analyse zu den Langzeitkorrosionsexperimenten der Kupferlegierung CuNi30Mn1Fe bei 30°C mit der neu aufgebauten Bentonit-Zelle wurde abgeschlossen sind vollendet. Eine Auswertung der elektrochemischen Daten und der Oberflächenanalytik folgt.

Organisatorisches

- Am 2. Oktober 2024 fand das erste Meeting (online) zum Projekt *Advanced Corrosion Studies* statt. Dieses Projekt zielt auf die Implementierung von elektrochemischen Sensoren zum Monitoring der Korrosionsprozesse in In-situ-Anlagen im Grimsel-Testlabor ab. Die GRS, als Vertreter des IMKORB-Konsortiums hat zusammen mit Partnern aus NUMO (Japan) ihre Mitwirkung als aktiver Partner erklärt (NAGRA-Aktennotiz 24-0314).
- Beginn der Aktivitäten zur Teilnahme am Tochterprojekt InCoManD (EURAD-2).
- Aktive Teilnahme an der Analyse von Proben aus dem Rückbau eines Containers im Rahmen des SKB-Projektes *Prototype Repository*.
- Teilnahme eines Trainingskurs zur Auffrischung der technischen Handhabung bei der Bedienung des elektrochemischen Mikroskops.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Untersuchung der lateralen Inhomogenität der elektrochemischen Aktivität von Kugelgraphitstahl und von SKB eingereichten Kupferproben mittels der elektrochemischen Mikroskopie.
- Vollendung der Publikation von eingereichten und angefangenen Manuskripten
- Schreiben des Endberichtes.

5. Berichte, Veröffentlichungen

- A.G. Muñoz, D. Schild, Corrosion of spheroidal graphite cast iron GGG40 in anoxic Opalinus-Clay water: influence of hydrostatic pressure. Status: in review, Journal: *Material and Corrosion* (Wiley).
- A.G. Muñoz, D. Schild, S. Kaufhold, D. Dobrev, V. Viebranz, and Th. Hassel, Initial stage of corrosion of spheroidal graphite cast iron in saturated Wyoming bentonite under γ -radiation. Status: in preparation. Journal: *Corrosion Science* (Elsevier).

Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer: Karlsruher Institut für Technologie (Großforschungsaufgabe) Institut für Nukleare Entsorgung (INE)		Förderkennzeichen: 02 E 11981B
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Implementierung eines Monitoringsystems zur Evaluierung der Korrosionsvorgänge an Behältermaterialien in Bentonit-basierten Endlagerkonzepten (IMKORB), Teilprojekt B.		
Zuordnung zum FuE-Programm: C3.1 Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-) Phänomene und Prozesse		
Laufzeit des Vorhabens: 01.08.2021 bis 31.07.2025	Berichtszeitraum: 01.07.2024 bis 31.12.2024	
Gesamtkosten des Vorhabens: 459.413,62 EUR	Projektleiter: Dr. Finck	

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

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

AP 3: Laboruntersuchungen der Korrosion von Stahlcoupons in Bentonit.

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

AP 6: Dokumentation und Publikation.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

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

AP 3: Die Analyse der Proben aus Korrosionsexperimenten (Feinkornbaustahl, Federstahl) unter statischen Bedingungen in Autoklaven bei Raumtemperatur (RT) und bei 50°C wurde abgeschlossen, wobei die Auswertung einiger Analysen (z.B. XPS) noch aussteht. Für den Feinkornbaustahl wurden Vergleichsexperimente unter statischen Bedingungen bei RT mit ähnlichen Kontaktzeiten und einem weiteren Bentonit durchgeführt (Gaomiaozhi, welcher in China als potentiell Puffermaterial in Betracht kommen könnte). Es konnte hier kein signifikanter Unterschied zu den Ergebnissen aus Versuchen mit dem MX-80 Bentonit festgestellt werden. Die Analysen der Proben aus Versuchen unter dynamischen Bedingungen mit 6 Monaten Reaktionszeit wurden fortgesetzt, ebenfalls die Analyse der ultrazentrifugierten Porenwässern und die Analyse der Coupons. Es konnte die Bildung der Eisensekundärphasen Magnetit und Grüner Rost an der Stahl/Bentonit Grenzfläche nachgewiesen werden. Die Analyse der XAS Messungen von an dem Coupon anhaftendem Bentonit deutet auf die Neubildung von Phasen wie Magnetit, Eisenhydroxykarbonat (Chukanovit) und Eisensilikaten hin.

Aus Versuchen in Gefäßen mit gasdichten Schliffstopfen wurden Proben mit Kontaktzeiten bis zu 9 Monaten geöffnet. Für den Feinkornbaustahl nimmt die Korrosionsrate mit zunehmender Zeit ab, von ca. 12 µm/a nach 4 Wochen bis ca. 6 µm/a nach 9 Monaten. Der Start pH-Wert lag bei ca. 8.7 und hat sich in diesem Zeitraum kaum geändert. Die Analyse der Coupons mittels SEM-EDX hat gerade begonnen. Ein Versuch, in welchem die in-situ pH Entwicklung gemessen wird wurde gestartet, konnte noch nicht erfolgreich abgeschlossen werden.

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

AP 6: Das Schreiben der Dissertation wurde fortgesetzt.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP 3: (i) Die Auswertung der Analysen aller Proben aus Versuchen unter statischen und dynamischen Bedingungen soll abgeschlossen und ein mechanistisches Modell entwickelt werden. (ii) Aus Versuchen in Gefäßen mit gasdichten Schliffstopfen sollen Experimente mit 1 Jahr Kontaktzeit geöffnet und ausgewertet werden. Die ultrazentrifugierten Porenwässer aller Proben sollen mit IC und ICP-OES/MS quantifiziert werden.

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

AP 6: Die Dissertation soll fertiggeschrieben und verteidigt werden.

5. Berichte, Veröffentlichungen

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

Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer: Leibniz Universität Hannover		Förderkennzeichen: 02 E11981C	
Vorhabensbezeichnung: Verbundvorhaben: Implementierung eines Monitoringsystems zur Evaluierung der Korrosionsvorgänge an Behältermaterialien in Bentonitbasierten Endlager-Konzepten (IMKORB), Teilprojekt C			
Zuordnung zu den FuE-Feldern des Förderprogramms: C2.3 Geotechnische und technische Barrieren C2.4 Monitoring			
Laufzeit des Vorhabens: 01.08.2021 bis 31.07.2025		Berichtszeitraum: 01.07.2024 bis 31.12.2024	
Gesamtkosten des Vorhabens: 588.972,74 EUR		Projektleiter: Herr Dr.-Ing. Thomas Hassel	

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

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

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

AP1: Entwicklung der elektrochemischen Sensorik zur Anwendung in In-Situ-Experimenten

AP2: Laboruntersuchungen zum Einfluss des Materialzustandes (Herstellungsprozess und Zusammensetzung) auf den Korrosionsangriff der Metallcoupons

AP3: Laboruntersuchungen der Korrosion von Stahlcoupons in Bentonit

AP4: In-Situ Korrosionsuntersuchungen von Stahl in Bentonit am Untertagelabor in Grimsel

AP5: Design und Konstruktion einer optimierten In-Situ-Methodik zum Monitoring und zu Langzeitkorrosionsexperimenten

AP6: Koordination und Dokumentation

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Die Bewertung der korrosiven Eigenschaften der Behältermaterialien 56Si7 (1.5026), 15MnNi6-3 (1.6210), GJS 400-15 (0.7040), X12CrNi23-13 (1.14833), Zr702 (R60702) und CuNi30Mn1Fe (2.0882) erfolgte unter Berücksichtigung der Textur. Für den Werkstoff X12CrNi23-13 wurde eine orthorhombische Walztextur mit den geringsten Stromdichten und Korrosionspotentialen gegenüber der Referenzelektrode (Ag/AgCl/Cl⁻) in Normalrichtung ermittelt. Für 15MnNi6-3 (1.6210), GJS 400-15 (0.7040) und 56Si7 (1.5026) wurde eine Fasertextur durch gerichtete Erstarrung oder gerichtetes Umformen festgestellt. Aus der Textur resultieren geringe Stromdichten und Korrosionspotentiale in Normalrichtung. Die Korrosionseigenschaften der Querrichtungen sind dagegen nicht rotationssymmetrisch, so dass für die eine Querrichtung zur Symmetrieachse der Fasertextur ähnliche Stromdichten wie für die Normalrichtung vorliegen, während für die andere Querrichtung erhöhte Stromdichten und geringere Korrosionspotentiale ermittelt wurden. Neben den Kornorientierungen ist die Anisotropie der Kornmorphologie zu berücksichtigen, welche trotz einer rotationssymmetrischen Textur zu variierenden Korrosionseigenschaften führen kann. Die Werkstoffe 15MnNi6-3 (1.6210), GJS 400-15 (0.7040) und 56Si7 (1.5026) weisen ein bcc Bravais-Gitter auf und sind den ferritischen Stählen zuzuordnen. Die erhöhten Diffusionskoeffizienten im bcc-Gitter führen zu einem verstärkten Einfluss der Korngrenzendichte auf die Korrosionseigenschaften. Da prozessbedingt die Querrichtungen unterschiedliche Kornmorphologien aufweisen, folgen für die Querrichtung erhöhte Stromdichten und niedrigere Korrosionspotentiale. Für Zr702 (R60702) wurde eine ausgeprägte Textur mit einer senkrechten Orientierung der {002} zur Normalrichtung und einer senkrechten Orientierung der {100} zu einer der Querrichtungen und entsprechend einer senkrechten Orientierung von {110} zur anderen Querrichtung ermittelt. Da Netzebenen mit einer höheren Gitterpunktdichte eine höhere Bindungsenergie der Gitteratome und dadurch eine geringere Anfälligkeit gegenüber korrosiven Ereignissen aufweisen, wurden entsprechend niedrige Stromdichten und hohe Korrosionspotentiale für die Normalrichtung und die Querrichtung senkrecht zur {100} experimentell festgestellt. Im Gegensatz zu den vorherigen Werkstoffen weist CuNi30Mn1Fe (2.0882) eine regellose Orientierung der Körner auf. Da zusätzlich eine näherungsweise isotrope Kornmorphologie vorliegt, weist der Werkstoff in den geprüften Raumrichtungen isotrope Korrosionseigenschaften auf. Erfolgt ein relativer Vergleich der geprüften Werkstoffe – ohne Berücksichtigung der Raumrichtungen – untereinander, so liegen für Zr702 mit 0,04 $\mu\text{A}/\text{cm}^2$ die geringsten Stromdichten vor. Nachteilig ist hingegen, dass trotz der geringen Stromdichten Korrosionspotentiale von bis zu $-0,68\text{ V}$ gegenüber der Referenzelektrode (Ag/AgCl/Cl⁻) vorliegen. Eine vorteilhaftere Kombination aus geringen Stromdichten von 0,06 $\mu\text{A}/\text{cm}^2$ mit Korrosionspotentialen von minimal $-0,18\text{ V}$ liegt für den Werkstoff CuNi30Mn1Fe vor. Die Abfolge der Werkstoffe mit zunehmender Stromdichte ist: Zr702, CuNi30Mn1Fe, GJS-400-15C (Gussblock), 56Si7, GJS-400-15C (zylindrische Gussproben – durch die GRS bereitgestellt), X12CrNi23-13, 15MnNi6-3. Für das Korrosionspotential ergibt sich hingegen folgende Abfolge (abnehmend): CuNi30Mn1Fe, X12CrNi23-13, 15MnNi6-3, 56Si7, GJS-400-15C (Gussblock), GJS-400-15C (Gussproben – durch die GRS bereitgestellt), Zr702.

Die ortsbezogene Ermittlung der Kornorientierungen und elektrochemischen Eigenschaften wurde begonnen. Die Materialien CuNi30Mn1Fe (2.0882) und GJS 400-15 (0.7040) wurden im Dialog mit dem Projektpartner GRS gewählt. Auf den Coupons wurden Mikrohärteeindrücke in einem Raster mit einem Punktabstand von 250 μm eingebracht. Hierdurch konnten die ortsaufgelösten Kornorientierungsabbildungen der Lage und Orientierung des Probencoupons zugeordnet werden.

4. Geplante Weiterarbeiten

Im 1. HJ 2025 sollen zum einen die EBSD Messungen abgeschlossen werden und die Proben der GRS übergeben werden. Zusätzlich soll in Zusammenarbeit mit der GRS die Wechselwirkung zwischen der Kornorientierungen und den elektrochemischen Eigenschaften untersucht und bewertet werden.

5. Berichte, Veröffentlichungen

keine

Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer: TU Clausthal - Lehrstuhl für Geomechanik und multiphysikalische 02 E 11991		Förderkennzeichen: 02 E 11991
Vorhabensbezeichnung: Entwicklung und Validation einer neuartigen Versuchstechnik für triaxiale Kriechversuche bei geringer deviatorischer Belastung (KRIECHTECH)		
Zuordnung zu den FuE-Feldern des Förderprogramms: C1 .2 Charakterisierung des Geosystems und Geosynthese		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2021 bis 30.09.2024	Berichtszeitraum: 01.07.2024 bis 30.09.2024	
Gesamtkosten des Vorhabens: 304.468,00 EUR	Projektleiter: apl. Prof. Dr.-Ing. habil. Uwe Düsterloh	

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

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 $\sigma_v \approx 1 \text{ MPa} - 6 \text{ MPa}$.

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: -

AP2: -

AP3: Durchführung von Triaxialkriechversuchen mit neuartiger verzerrungsgeregelter Versuchstechnik.

AP4: Diskretisierung ausgewählter Tragsysteme für numerische Sensitivitätsanalysen.

AP5: Fertigstellung des Abschlussberichtes.

4. Geplante Weiterarbeiten

-

5. Berichte, Veröffentlichungen

Abschlussbericht.

Auftragnehmer: Karlsruher Institut für Technologie (Universitätsaufgabe)		Förderkennzeichen: 02 E 12001A
Vorhabensbezeichnung: Verbundvorhaben: Sandwich Support Projekt 1: Heterogene Bentonithydratation (Sandwich-SP1), Teilprojekt A		
Zuordnung zum FuE-Programm: C2.3 Geotechnische und technische Barrieren		
Laufzeit des Vorhabens: 01.12.2021 bis 30.06.2025	Berichtszeitraum: 01.07.2024 bis 31.12.2024	
Gesamtkosten des Vorhabens: 323.058,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Katja Emmerich	

1. Vorhabenziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

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

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

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

AP4: Koordination/Berichtswesen (KIT)

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1: Das Hauptaugenmerk lag weiterhin auf der Verarbeitung und Interpretation der verschiedenen mineralogischen, morphologischen und geotechnischen Charakterisierungsdaten von Calcigel und Secursol UHP. Die große Menge an Ergebnissen aus verschiedenen Versuchen wurde aufbereitet und als Publikation eingereicht. Es wird als Grundlage für alle weiteren Versuche und deren Auswertung dienen.

Die Wasserdampfadsorptionsisothermen der homoionischen Tonfraktionen wurden fortgesetzt und nach Verlust der Messeinrichtung wurden alternative Verfahren installiert.

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

Die Kationenaustauschkapazität und die elektrische Leitfähigkeit von 18 Proben aus dem Säulentest mit Calcigel wurden analysiert. Die Analyse der austauschbaren Kationen ist noch nicht abgeschlossen. Anschließend wird eine Auswertung der Daten vorgenommen.

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

Der Beitrag der Zwischenschichtporosität zur Gesamtporosität als dritte Porosität, die das Doppelporositätsmodell erweitert und präzisiert, wird für homoionische Modellstrukturen von Montmorillonit berechnet. Zu diesem Zweck wird die stabilste Struktur von homoionischem Montmorillonit mit unterschiedlichen Schichtladungen in wasserfreiem und hydratisiertem Zustand durch ab initio Berechnungen ermittelt.

AP4: Der Projektstand und geplante Weiterarbeiten wurden abgestimmt. Zudem findet ein kontinuierlicher Austausch mit dem Sandwich-HP2 (02E11799A/B/C) statt.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP1: Verbesserung der Reproduzierbarkeit der Quelldruckmessungen, Anpassung der Bildverarbeitung zur Auswertung der μ CT Aufnahmen hinsichtlich Gefüge und Porenverteilung und deren Änderung während der Aufsättigung,

AP2: Mineralogische Charakterisierung der Säulentests wird fortgesetzt

AP3: Kinetische Beschreibung der Quelldruckentwicklung als Funktion der Sättigung und des Kationenaustauschs

5. Berichte, Veröffentlichungen

Im Rahmen des Projektes wurden 3 Beiträge (1 Vortrag und 2 Poster) während der Clay Conference 2024 in Hannover (11/24) präsentiert. Federführend war KIT für den folgenden Beitrag:

Asaad et al.; Mineralogical and geotechnical characterization of two German bentonites from Westerwald and Bavaria (P 295)

Auftragnehmer: Ruhr-Universität Bochum (RUB) – Lehrstuhl für Bodenmechanik, Grundbau und Umweltgeotechnik, 44780 Bochum		Förderkennzeichen: 02 E 12001B
Vorhabensbezeichnung: Verbundvorhaben: Sandwich Support Projekt 1: Heterogene Bentonithydratation (Sandwich-SP1), Teilprojekt B		
Zuordnung zum FuE-Programm: C2.3 Geotechnische und technische Barrieren		
Laufzeit des Vorhabens: 01.12.2021 bis 30.06.2025	Berichtszeitraum: 01.07.2024 bis 31.12.2024	
Gesamtkosten des Vorhabens: 268.932,00 EUR	Projektleiter: Dr.-Ing. Wiebke Baille	

1. Vorhabenziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

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

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

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

AP4: Koordination/Berichtswesen (KIT)

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

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

AP2: Die geotechnische Klassifizierung und die Elementversuche mit direkter Bewässerung und ödometrische Kompressionsversuche sind abgeschlossen.

Bei der Durchführung der ersten saugspannungskontrollierten Quelldruckversuche (schrittweise Erhöhung der relativen Feuchtigkeit mittels *vapour equilibrium technique* (VET) und kontinuierliche Messung des Quelldrucks) sind technische Probleme aufgetreten. Die Versuche mussten unterbrochen werden. Nach Modifizierung der Versuchstechnik sollen die Versuche wieder aufgenommen werden und eine Probe je Material untersucht werden.

Die Auswertung der Erprobung des ersten Säulenversuchs (Calcigel) hinsichtlich der räumlichen Verteilung des Porenraums und des Sättigungsgrads wurde abgeschlossen. Der zweite Säulenversuch (Secursol) wurde im November 2024 erfolgreich eingebaut und wird seit knapp 2 Monaten bewässert. Zuvor wurden die benötigten TDR-Sensoren für die Messung des Wassergehalts materialspezifisch kalibriert. Während der Infiltration werden die Entwicklung der axialen und radialen Spannung (Quelldruck), relativen Feuchte, Temperatur, Wassergehalt gemessen. Auch für den zweiten Säulenversuch ist eine Infiltrationszeit von einem Jahr bis November 2025 und anschließende Beprobung geplant.

AP3: Die Nachrechnung der Elementversuche (Oedometerversuche / Quelldruckversuche homogen, Quellhebungsversuche) ist abgeschlossen. Die Nachrechnung des ersten Säulenversuchs (Calcigel) erfolgt derzeit.

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

4. Geplante Weiterarbeiten

AP2: Durchführung der saugspannungskontrollierten Versuche und Monitoring des zweiten Säulenversuchs (Secursol) bis November 2025.

Einreichung eines Papers zum ersten Säulenversuch mit Calcigel.

Geplanter Abstract zur AIPEA - 18th International Clay Conference (Trinity College, Dublin, Ireland, July, 13t-18th, 2025) zu den Elementversuchen.

AP3: Vervollständigung der Simulation beider Säulenversuche.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Im Rahmen des Projektes wurden 3 Beiträge (1 Vortrag und 2 Poster) während der Clay Conference 2024 in Hannover (11/24) präsentiert. Federführend war RUB für die folgenden Beiträge:

Nitsch et al.; Cross-scale assessment of the hydromechanically coupled behavior of two German bentonites (T 158)

Baille et al.; Assessment of the effect of heterogeneities on the hydromechanically coupled behavior of two German bentonites (P 436)

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 12012A
Vorhabensbezeichnung: Weiterentwicklung von d ^{3f++} : Hydrogeologische Modellierung im regionalen Maßstab (HYMNE II)		
Zuordnung zum FuE-Programm: C3.1 Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-) Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung C3.3 Werkzeuge der Sicherheitsanalysen		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2022 bis 30.09.2025	Berichtszeitraum: 01.07.2024 bis 31.12.2024	
Gesamtkosten des Vorhabens: 1.915.790,00 EUR	Projektleiterin: A. Schneider	

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

Folgende Arbeitspakete werden von der GRS bearbeitet:

AP 1: Erweiterung der Anwendbarkeit von d^{3f++} für Modelle im Kristallin und Ton

AP 1.1 Explizit zu berücksichtigende Klüfte/Störungszonen (DFN) (Konzepte)

AP 1.2 Kontinuumsmodelle (EPM) (Konzepte)

AP 1.3 Technische Verbesserungen (Konzepte)

AP 2: Erweiterung des Anwendungsbereiches von d^{3f++}

AP 2.1 Permafrost: Berücksichtigung der Salinität bei den Phasenübergängen

AP 2.2 Radionuklidtransport: Genauere und effektivere Modellierung

AP 4 Anwendungsrechnungen

AP 4.1 Würfel mit Klufnetzwerk

AP 4.2 Äspö site descriptive model

AP 4.3 Laborexperiment (Richardsgleichung)

AP 4.4 Norddeutscher Küstenraum (Ankopplung Vorfluter)

AP 5 Wartung des Codes (Unterauftrag)

AP 6 Projektleitung und Dokumentation

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP 1.1 Der Algorithmus für das automatisierte Extrudieren niederdimensional abgebildeter Klüfte wurde zunächst für den 2d Fall fertiggestellt. Die Implementierung in 3d ist weit fortgeschritten.
- AP 1.3 Der Import von Kluffnetzwerken wurde weiter automatisiert.
- AP 2.1 Die Arbeit an den Permafrost-Modellen unter Berücksichtigung der Salinität wurde intensiv fortgesetzt. Die Ursachen für die Abweichungen der Ergebnisse von den Resultaten aus dem INTERFROST-Programm (ohne Salinitätseinfluss) wurden analysiert.
- AP 4.1 Zwei Modelle aus der PA-Task Crystalline aus DECOVALEX23 wurden implementiert: Der 4-Fracture Benchmark in Kombination mit einem äquivalent-porösen Medium (EPM) wurde vollständig aufgesetzt und der Tracertransport (zunächst ohne Zerfall und Sorption) mit sehr guter Übereinstimmung berechnet. Das Modell für den Reference Case wurde ebenfalls aufgesetzt. Die Berechnung der Grundwasserströmung funktioniert.
- AP 4.2 Für die Zonen mit unterschiedlichen hydrogeologischen Eigenschaften im Gebiet wurden Rasterdateien für das EPM Modell erzeugt.
- AP 4.3 Die Arbeiten an der Modellierung des Laborexperimentes wurden weitergeführt.
- AP 4.4 Die Modellkalibrierung wurde mit Hilfe des in HYMNE implementierten Tools verbessert.
- AP 5 Probleme bei der Parametrisierung von Transportmodellen wurden beseitigt und neue Eingabemöglichkeiten geschaffen. Die Anwendung des Parameterschätzers wurde vereinfacht.
- AP 6 Das dritte Projektstatusgespräch fand am 21./22.11.2024 in Präsenz in Maulbronn statt.

4. Geplante Weiterarbeiten

- AP 1.1 Fertigstellung der Implementierung des 3d Algorithmus zum Extrudieren von Klüften.
- AP 1.2 Implementierung eines Ansatzes zur elementgrößenabhängigen Anwendung von Permeabilitäten (Mapping).
- AP 2.1 Die Modellrechnungen zur Berücksichtigung der Salinität bei den Phasenübergängen und werden weitergeführt und die Modelle weiter verbessert. Zustandsgleichungen und konstitutive Beziehungen werden ergänzt. Der Bericht über den mathematischen Rahmen wird vervollständigt.
- AP 4.1 Die Arbeiten am 4-Fracture Benchmark werden abgeschlossen. Das Modell für den Reference Case wird vervollständigt.
- AP 4.2 Extrudieren der Haupt-Störungszonen im Modell und Durchführung von Strömungsrechnungen.
- AP 4.3 Die Arbeiten an der Modellierung des Laborexperimentes werden abgeschlossen.

5. Berichte, Veröffentlichungen

keine

Auftragnehmer: Johann Wolfgang Goethe Universität Frankfurt		Förderkennzeichen: 02 E 12012B	
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Weiterentwicklung von d ^{3f++} : Hydrogeologische Modellierung im regionalen Maßstab (HYMNE II), Teilprojekt B			
Zuordnung zum FuE-Programm: C3.1 Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-) Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung C3.3 Werkzeuge der Sicherheitsanalysen			
Laufzeit des Vorhabens: 01.12.2022 bis 30.11.2025		Berichtszeitraum: 01.07.2024 bis 31.12.2024	
Gesamtkosten des Vorhabens: 779.892,00 EUR		Projektleiter: Priv.-Doz. Dr. Arne Nägel	

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

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

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

AP 2: Erweiterung des Anwendungsbereiches von d^{3f++} (2.1. Permafrost: Berücksichtigung der Salinität bei den Phasenübergängen, 2.2. Radionuklidtransport: Genauere und effektivere Modellierung) ^[1]_{SEP}

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

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

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

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

Die Arbeiten wurden entsprechend der im Antrag angegebenen Vorgehensweise fortgesetzt.

AP 2: Erweiterung des Anwendungsbereiches von d3f++ (2.1. Permafrost: Berücksichtigung der Salinität bei den Phasenübergängen, ^{SEP}2.2. Radionuklidtransport: Genauere und effektivere Modellierung)

Die Arbeiten wurden entsprechend der im Antrag angegebenen Vorgehensweise fortgesetzt.

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

Als zeitparalleles Lösungsverfahren wurde MGRIT in UG4 integriert und auf die quasistatischen Biot-Gleichungen angewendet, um hierfür die Rechenzeit zu verkürzen. Dabei werden die Berechnungen in mehrere Zeitintervalle aufgeteilt, die gleichzeitig auf verschiedenen Prozessoren ausgeführt werden. Durch eine Hierarchie aus Zeitgittern wird ein Verfahren implementiert, welches einen Mehrgitterzyklus benutzt, der im Wesentlichen die bereits bestehenden Routinen von UG4 verwendet, so dass das Verfahren auch auf andere lineare Probleme angewendet werden kann. Die Gesamtzeit für die Simulation der Biot-Gleichungen kann um etwa den Faktor 10 reduziert werden. Das Verfahren zeigt bis zur Verwendung von 65'536 Prozessoren gute Skalierungseigenschaften. Das Verfahren muss nun auf die Gleichungen für Dichteströmungen übertragen werden.

Das LIMEX-Plugin wurde auf seine Beschleunigung der Simulation des Halinflusses mit Cs-135-Transport im Gebiet Gorleben untersucht. Durch die Verwendung des Schalters `limexDesc.partialVeloMaskOPT=1` wurde eine signifikante Beschleunigung erreicht. Zudem wurde das LIMEX-Verfahren aktualisiert, um den Zeitschritt nach der relativen Norm statt nach der skalierten Norm auszuwerten. Diese Änderung beseitigt den Nachteil, der mit der Zuweisung angemessener Gewichte in einem multivariablen System verbunden ist, um den Fehler für jede Variable zu ermitteln. Zusammenfassend lässt sich sagen, dass das neu entwickelte LIMEX-Verfahren die Testsimulation erfolgreich um den Faktor 400 beschleunigt.

Für die iterative Kopplungsmethode von Oberflächen- und Untergrundströmungen wurde ein Framework für die Verteilung beider Domänen implementiert. Um die Kommunikationsschritte zu minimieren, senden wir Schnittstellenelemente an denselben Rechenknoten. Zusätzlich pflegen wir eine angemessene Element-Downstream-Ordnung der Oberflächendomäne mit einem verteilten Breitensuche-Ansatz. Massenerhaltungsexperimente wurden verwendet, um die Genauigkeit von Austauschflussberechnungen zu bewerten, indem die Flussintegration über unterirdische Grenzflächen mit Änderungen im unterirdischen Speicherterm verglichen wurde. Schließlich wurden in qualitativen Experimenten verschiedene Konfigurationen von Oberflächen- und Untergrundinteraktionen berücksichtigt - insbesondere Flüsse, die ansteigen und abfallen.

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

Die Arbeiten wurden entsprechend der im Antrag angegebenen Vorgehensweise fortgesetzt.

4. Geplante Weiterarbeiten

Die Arbeiten werden entsprechend der im Antrag angegebenen Vorgehensweise fortgesetzt.

5. Berichte, Veröffentlichungen

S. Lu, D. Logashenko, A. Naegel, S. Matthai and G. Wittum: *Fully Coupled and Fully Implicit Discretization for Large-Scale Simulation of Miscible Multiphase Flow*, ECMOR 2024, Sep 2024, Volume 2024, p.1 – 10, <https://doi.org/10.3997/2214-4609.202437053>

Shuai Lu; Dmitry Logashenko; Stephan K Matthai; Arne Naegel; Gabriel Wittum: *Alternative Dissolution-Rate Controlled Model and Time Adaptive, High Resolution Scheme for Site-Scale Subsurface Carbon Sequestration Simulation* (eingereicht bei Computational Geosciences)

Arne Nägel: *Scalable HPC Solvers for Partial Differential Equations and Applications in Soil Physics and Biology*, Vortragsserie auf der Sommerschule der Heidelberg Graduate School for Physics, Molveno, June 9-15 2024

Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer: TU Clausthal – Lehrstuhl für Geomechanik und multiphysikalische Systeme		Förderkennzeichen: 02 E 12022A
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Internationales Benchmarking zur Verifizierung und Validierung von TH ² M-Simulatoren insbesondere im Hinblick auf fluiddynamische Prozesse in Endlagersystemen - Erweiterung auf multiphysikalische Ansätze und mehrdimensionale Modellgeometrien (BenVaSim II), Teilprojekt A		
Zuordnung zum FuE-Programm: C3.1 Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-) Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung		
Laufzeit des Vorhabens: 01.02.2023 bis 31.01.2026	Berichtszeitraum: 01.07.2024 bis 31.12.2024	
Gesamtkosten des Vorhabens: 523.623,00 EUR	Projektleiter: Eleni Gerolymatou	

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

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

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Bisher wurden unter den Projektpartnern dreizehn Treffen durchgeführt. Es wurden geringfügige Änderungen an den bisher bestehenden Modellen im Vergleich zu dem vorangegangenen Berichtszeitraum vorgenommen.

Für die zweidimensionalen Scheibenmodelle Model 3.1 (TM), Model 3.2 (TH¹) und Model 3.3 (TH²) sind zusätzliche und korrigierte Berechnungsergebnisse von den Projektpartnern eingegangen und wurden seitens der Projektkoordination vergleichend gegenübergestellt.

Für die oben genannten Modelle wurden Varianten mit einem anisotropen Wirtgestein definiert. Die bei den letzten Treffen des vorangegangenen Berichtszeitraums diskutierten anisotropen TH²M-Parameter und Modelle wurden unter Absprache mit den Partnern angepasst. Für Model 3.1 (anisotrop) (TM) sind bereits von nahezu allen Partnern Berechnungsergebnisse eingegangen und bei dem letzten Treffen des gegenwärtigen Berichtszeitraums vorgestellt und diskutiert worden.

Der Projektkoordinator konnte für die weiterführenden anisotropen Berechnungsmodelle Model 3.2 (anisotrop) (TH¹) und Model 3.3 (anisotrop) (TH²) keine Pilotsimulationen zu Verfügung stellen, da der verwendete Simulator FTK die Kopplung von thermischen und hydraulischen Prozessen im Hinblick auf anisotrope Parameter noch nicht hinreichend unterstützt. Jedoch sind von Partnern erste Simulationsergebnisse für diese Modelle eingegangen.

Für Model 3.1 (TM) wurde eine abgewandelte analytische Lösung vorgestellt, die auf einem Sektormodell basiert und nahezu identische Ergebnisse zu einem entsprechenden numerischen Modell aufzeigt.

Im Hinblick auf die Interpretation und Analyse der noch bestehenden Diskrepanzen der Berechnungsergebnisse zwischen den Projektpartnern bei Model 1.4 wurde der Fokus auf die thermohydraulischen Eigenschaften der Wasser- und Gasphase gesetzt (Funktionen für Dichte, Viskosität, Löslichkeit und Dampfdruck) und mit den Partnern diskutiert. Jedoch zeigten durch die Projektkoordination durchgeführte Vergleiche von entsprechenden Testsimulationen, dass Variationen der oben genannten Funktionen einen geringen Einfluss auf die Berechnungsergebnisse haben und sich die Diskrepanzen aus der unterschiedlichen Interpretation des Porengasdrucks unter Vollsättigung ergeben könnten. Eine tabellarische Gegenüberstellung der thermohydraulischen Funktionen der Simulatoren wurde seitens der Projektkoordination erstellt.

Model 2 wurde nach Rücksprache mit den Partnern in einem 3-D Model umwandelt. Erste Ergebnisse für die reine thermomechanische Simulation liegen vor.

4. Geplante Weiterarbeiten

Für das kommende Halbjahr werden weitere aktualisierte Simulationsergebnisse der Partner für Model 1.4 und für die Simulationsvarianten von Model 3 (inklusive anisotroper Varianten) sowie von Model 2 erwartet.

Die Analyse der noch bestehenden Diskrepanzen der Berechnungsergebnisse zwischen den Projektpartnern wird weiterhin bestehen ein zentrales Ziel bleiben, jedoch wird er Fokus auf das unterschiedliche Verhalten bei Vollsättigung gelegt werden.

Weiterhin wird ein ausführlicher Partnervergleich mit einer verknüpften Interpretation der Berechnungsergebnisse angestrebt.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Noch keine vorhanden.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 12022B
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Internationales Benchmarking zur Verifizierung und Validierung von TH ² M-Simulatoren insbesondere im Hinblick auf fluiddynamische Prozesse in Endlagersystemen - Erweiterung auf multiphysikalische Ansätze und mehrdimensionale Modellgeometrien (BenVaSim II), Teilprojekt B		
Zuordnung zum FuE-Programm: C3.1 Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-) Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung		
Laufzeit des Vorhabens: 01.02.2023 bis 31.01.2026	Berichtszeitraum: 01.07.2024 bis 31.12.2024	
Gesamtkosten des Vorhabens: 512.650,00 EUR	Projektleiterin: Larissa Friedenberg	

1. Vorhabenziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

AP 1: Entwicklung generischer Simulationsmodelle und Definition von Parametersätzen

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

AP 2: Durchführung und Bewertung von Modellrechnungen

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

AP 3: Vergleich und Diskussion der Ergebnisse

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

AP 4: Synthese und Präsentation der Endergebnisse

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

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im Berichtszeitraum fanden 2 virtuelle Meetings (15.08, 01.10) und ein hybrides Meeting am 26.11 bei der BGR in Hannover statt. In den Meetings wurden Ergebnisse zu den bisher bearbeiteten Modellen verglichen und diskutiert. Der Vergleich der Implementierung der Fluideigenschaften in den unterschiedlichen Simulationscodes wurde fortgesetzt, ist aber noch nicht vollständig abgeschlossen.

Die Simulationsarbeiten für das zweidimensionale Modell (Modell 3) wurden fortgesetzt. Dabei wurden einerseits die Ergebnisse der TH- und TH²-Simulation modifiziert und andererseits eine TM-Simulation für Modell 3 mit anisotropem mechanischen Verhalten und einer anisotropen Wärmeleitfähigkeit aufgesetzt.

4. Geplante Weiterarbeiten

Bearbeitung der einzelnen APs entsprechend der Vorhabensbeschreibung.

5. Berichte, Veröffentlichungen

-

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 12032
Vorhabensbezeichnung: Methoden zur experimentellen und numerischen Analyse der geologischen Barriere eines Endlagers in tonreichen Sedimentgesteinsformationen (MAGNUS)		
Zuordnung zum FuE-Programm: C3.1 Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-) Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2022 bis 30.09.2025	Berichtszeitraum: 01.07.2024 bis 31.12.2024	
Gesamtkosten des Vorhabens: 1.462.465,00 EUR	Projektleiter: Dr. Marvin Middelhoff	

1. Vorhabenziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Das Gesamtziel des MAGNUS-Vorhabens ist die Evaluierung, Optimierung und Standardisierung von experimentellen sowie numerischen Methoden, die zur Analyse des richtungs- und zeitabhängigen Verhaltens von tonreichem Sedimentgestein unter thermischen, hydraulischen und mechanischen (THM) Randbedingungen genutzt werden. Die Zielstellungen der verschiedenen Arbeitspakete des MAGNUS-Vorhabens sind so miteinander gekoppelt, dass das multimaßstäbliche Materialverhalten einer (repräsentativen) tonreichen Sedimentgesteinsformation (Sandige Fazies des Opalinustons (OPA-S), FL Mont Terri, CH) unter Verwendung eines nichtlokalen zeitabhängigen anisotropen THM gekoppelten Stoffmodells (Mánica-Modell), einschließlich der Berücksichtigung eines qualifizierten Eingangsparametersatzes, reproduziert werden kann.

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

AP 1: Probenahme und Probelagerung

Das Ziel des **UAP 1.1** ist die Evaluierung, Optimierung und Standardisierung von Methoden zur Entnahme von repräsentativen Probenmaterial aus OPA-S. Im Rahmen dieses UAP wird ein Mini-Mine-By (MMB)-Experiment in situ durchgeführt. **UAP 1.2** beabsichtigt die Konzeptionierung und Evaluierung von Behältern, die den Transport und die langfristige Lagerung von Probenmaterial aus tonreichem Sedimentgestein ermöglichen.

AP 2: Methodenentwicklung zur experimentellen Analyse im REV-Maßstab

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

AP 3: Methodenentwicklung zur numerischen Analyse in multiplen Maßstäben

UAP 3.1 umfasst drei Zielstellungen: Es werden zunächst numerische Modelle mittels des Finite-Elemente-Codes „CODE_BRIGHT“ im Pre- und Postprozessor „GiD“ generiert. Anschließend werden sie in Verbindung mit dem Mánica-Modell verwendet, um die zuvor durchgeführten Experimente unter Berücksichtigung der Initial- sowie Randbedingungen zu reproduzieren. Während der Reproduktion der Experimente werden die numerischen Eingangsparemeter ermittelt und der Eingangsparemeteratz für den REV-Maßstab qualifiziert. Im Rahmen des **UAP 3.2** wird der Eingangsparemeteratz in Verbindung mit dem Mánica-Modell zur Verbesserung der Simulationen von In situ-Experimenten verwendet.

AP 4: Dokumentation

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

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Es wird im Rahmen des **UAP 1.1** das MMB-Experiment in der OPA-S durchgeführt. Das Experiment umfasst folgende Phasen: 1. Prä-Experiment-Monitoring der Porendrücke (einschließlich der Bestimmung der Mindest-Probenahme-Teufe) mittels Mini-Piezometern, die in unterschiedlichen Teufen installiert worden sind, 2. Kerngewinn (MMB-Experiment) und 3. Post-Experiment-Monitoring der Porendrücke. Die Phasen sind erfolgreich abgeschlossen worden. Die Porendrücke in Teufen von 6m und 12m sind seit mehr als drei Monaten stabil.

Im Rahmen des **UAP 1.2** sind zwei Behälter-Typen konzipiert und produziert worden: 1. PE-Druckbehälter und 2. gespanntes PE-Gebinde (bestehend aus Zurrurt, PU-Schaummatte und PE-Rohr). Während des Kerngewinns ist die Methodik zu deren Konditionierung erfolgreich getestet und etabliert worden. Die Behälter-Typen werden zurzeit im Hinblick auf ihre Funktionsweise und langfristige Wirksamkeit hin getestet.

Es sind im Rahmen des **UAP 2.1** experimentelle Methoden zur Analyse des Materialverhaltens unter relevanten Initial- und Randbedingungen konzipiert, optimiert und standardisiert worden. Im Berichtszeitraum ist damit fortgefahren worden, das Retentions- sowie das richtungs- und zeitabhängige Spannungs-/ Dehnungs-/ Bruchverhaltens des Materials in gesättigten Bedingungen zu analysieren. Insbesondere Prüfkörper, welche senkrecht zur Schichtung orientiert sind, sind im Berichtszeitraum berücksichtigt worden.

Im Rahmen des **UAP 2.2** sind erste physikalische Eingangsparameter für das Mánica-Modell generiert worden.

Um die in UAP 2.1 durchgeführten Experimente repräsentativ numerisch abzubilden, sind im Rahmen des **UAP 3.1** numerische Modelle mittels CODE_BRIGHT und GiD entwickelt worden, deren Funktion mit einem für Callovo-Oxfordian-Tonstein qualifizierten Eingangsparametersatz im Berichtszeitraum getestet werden.

Im Berichtszeitraum sind keine Arbeiten im Rahmen des **UAP 3.2** durchgeführt worden.

4. Geplante Weiterarbeiten

Bedeutende Schwierigkeiten bzw. Probleme führen zu einem verzögerten Anlaufen der experimentellen Arbeiten. Es besteht daher die Notwendigkeit der gleichzeitigen Bearbeitung mancher UAP.

5. Berichte, Veröffentlichungen

- keine -

Auftragnehmer: BGE TECHNOLOGY GmbH, Eschenstraße 55, 31224 Peine		Förderkennzeichen: 02 E 12042A	
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Erarbeitung einer Methodik zur systematischen Ableitung von zu erwartenden und abweichenden Entwicklungen im Kristallingestein in Deutschland und exemplarische Anwendung als Grundlage zur Bewertung des sicheren Einschlusses unter Berücksichtigung von Optimierungsmaßnahmen (CHRISTA-III), Teilprojekt A			
Zuordnung zum FuE-Programm: C3.2: Methodische Grundlagen der Nachweisführung C3.3: Werkzeuge der Sicherheitsanalysen			
Laufzeit des Vorhabens: 01.11.2022 bis 31.10.2026		Berichtszeitraum: 01.07.2024 bis 31.12.2024	
Gesamtkosten des Vorhabens: 576.874,19 EUR		Projektleiter: Dr. Christian Müller	

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

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

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1: In diesem AP soll geklärt werden, wie sich Entwicklungen systematisch und nachvollziehbar ableiten lassen. Die Grundlagen der vorhandenen Methodik sind auch auf Kristallingesteine anwendbar, erfordern jedoch gesteins- und sicherheitskonzeptspezifische Anpassungen. Eine neue FEP-Datenbank wurde entwickelt und mit den erforderlichen Informationen gefüllt. Grundlagen der Methodik zur Szenarienentwicklung sind der FEP-Katalog und Initialgruppen, die wichtige Barrierensysteme und ihr Umfeld beschreiben. In der Nachverschlussphase des Endlagers wirken zahlreiche Prozesse, die zur Radionuklidmobilisierung und zum -transport führen. Die Intensität dieser Prozesse wird in Ausprägungsdokumenten abgeleitet, die Wechselwirkungen von Komponenten und Prozessen beschreiben. Neben den genannten Grundlagen sind Annahmen zur Klimaentwicklung, Funktionalität der geotechnischen Barrieren und das geologische Standortmodell wichtige Elemente. Die erwartete Entwicklung des Endlagersystems ergibt sich aus chemischen, thermischen, mechanischen und hydraulischen Prozessen sowie der Mobilisierung und dem Transport von Radionukliden.

AP4: Das Ziel ist die Optimierung des Endlagersystems gemäß §12 der EndlSiAnfV, mit Schwerpunkt auf der Langzeitsicherheit, die durch die „Qualität des sicheren Einschusses“ und die „Robustheit des Endlagersystems“ definiert ist. Die Qualität des sicheren Einschusses konzentriert sich auf die Barrierenisolierung der Abfälle, während die Robustheit die Widerstandsfähigkeit des Systems auch unter abweichenden Entwicklungen gewährleistet. Optimierungen werden im Rahmen der technischen Auslegung und im Ergebnis der Sicherheitsanalysen entwickelt und mithilfe des §12(2) der EndlSiAnfV überprüft, um die Sicherheit des Endlagers über die Erfüllung der Mindestanforderungen hinaus zu gewährleisten. Eine methodische Vorgehensweise wurde entwickelt, um gezielt Maßnahmen zur Optimierung der Robustheit abzuleiten, wobei der FEP-Katalog als Grundlage dient. Exemplarisch wird die Methodik auf den Endlagerbehälter angewendet, indem primäre Eigenschaften identifiziert und potenzielle Optimierungsmaßnahmen formuliert werden, die die Widerstandsfähigkeit gegenüber Prozessen wie Metallkorrosion, Spannungsübertragungen und Erdbeben verbessern sollen.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP1: Die Beschreibung der erwarteten Entwicklung wird unter Anwendung der neuen Methodik fertiggestellt. Im Anschluss werden verschiedene methodische Ansätze zur Ableitung abweichender Entwicklungen diskutiert und dann für das CHRISTA-Modell exemplarisch für die verschiedenen methodischen Ansätze erprobt.

AP2: Die bereits durchgeführten Berechnungen am Basisfall sollen um Konzeptkombinationen erweitert werden. Durch Parametervariationen, welche zusätzlich zu den zu erwartenden Entwicklungen auch abweichende Entwicklungen repräsentieren, soll ein Sicherheits- bzw. Robustheitsgewinn quantifiziert werden.

AP4: In einem ersten Schritt wurden für die drei auf den Behälter einwirkenden Prozesse Optimierungsmaßnahmen formuliert. Diese Maßnahmen werden im weiteren Verlauf diskutiert und weiter ausgearbeitet.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Lommerzheim, A.; Frenzel, B.; Mayer, K.M.; Müller, C.; Neuhaus, M. ; Weitkamp, A.; Wolf, J.: A systematic approach to scenario development for long-term safety assessments for a high-level waste (HLW) repository concept in German crystalline rock.- NEA Integration Group for the Safety Case (IGSC) Symposium 2024, 8 – 11 October Budapest.

Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer: GRS gGmbH, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 12042B
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Erarbeitung einer Methodik zur systematischen Ableitung von zu erwartenden und abweichenden Entwicklungen im Kristallingestein in Deutschland und exemplarische Anwendung als Grundlage zur Bewertung des sicheren Einschusses unter Berücksichtigung von Optimierungsmaßnahmen (CHRISTA-III), Teilprojekt B		
Zuordnung zum FuE-Programm: C3.2: Methodische Grundlagen der Nachweisführung C3.3: Werkzeuge der Sicherheitsanalysen		
Laufzeit des Vorhabens: 01.11.2022 bis 31.10.2025	Berichtszeitraum: 01.07.2024 bis 31.12.2024	
Gesamtkosten des Vorhabens: 612.785,00 EUR	Projektleiter: Mayer	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Bei der Durchführung des Vorhabens werden folgende Arbeitspakete bearbeitet:

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

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

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP 1: Die zu erwartende Entwicklung am Beispiel des mKBS-3-Konzeptes wurde abgeleitet und diskutiert. FEP-Abhängigkeiten wurden in die neue FEP-Datenbank übertragen und umfangreich auf ihre Konsistenz geprüft. Lösungen für das Einpflegen von Literatur und das intuitive Bedienen der DB wurden implementiert.
- AP 2: Am 17.10. wurde auf einem Projektgespräch der Arbeitsstand und das weitere Vorgehen gemeinsam diskutiert. Es wurde eine Kombination des Referenzkonzeptes (mKBS3-Konzept) mit einem mewG-Konzept (variierte Mächtigkeit 20 m, 50 m) dargestellt. Die jährliche Anzahl der Atome (JAN) nach § 4 und die Dosis nach § 7 EndlSiAnfV wurden berechnet. Am 4.11. wurden im Rahmen eines von der GRS organisierten internationalen digitalen Workshops zu Bentonit im Kristallin ein Vortrag über eine beispielhafte Sensitivitätsanalyse der Berechnungen mit CLAYPOS (Transportpfad von Behälter durch den Bentonit bis zur Grenze des Kristallinen Wirtsgesteins) gehalten.
- AP 3: Am 25.9. wurde in einem Projektgespräch der Stand der Arbeiten vorgestellt und diskutiert. Die Log-Normal-Verteilung für die Permeabilität wurde mit der Permeabilitätsverteilungen auf Grundlage der ODA-Permeabilität verglichen und die Ergebnisse diskutiert.

4. Geplante Weiterarbeiten

- AP 1: Die Beschreibung der abweichenden Entwicklungen ausgehend von verschiedenen Ansatzpunkten gemäß der Methode zur Szenarienentwicklung soll umgesetzt und anschließend diskutiert werden. Arbeiten an der FEP-DB sollen weitergeführt werden, sodass eine intuitive Ausgabe des FEP-Kataloges als PDF und Word-Dateien möglich ist und FEP-Abhängigkeiten verschiedener Ebenen übersichtlich dargestellt werden können.
- AP 2: Es ist geplant, die Sensitivitätsanalyse weiter auszubauen und eine Kombination mit einem überlagernden Deckgebirge zu betrachten.
- AP 3: Es ist geplant, in der Berechnung zusätzlich die Freisetzungsbedingungen der Radionukliden infolge des Versagens der Behälter einzubeziehen. Dabei wird die Möglichkeit, die Ergebnisse von CLAYPOS (AP2) mit den Berechnungen von OGS zu verknüpfen. Außerdem wird auf Grundlage der Berechnungsergebnisse die Performance des Endlagerungskonzeptes geprüft.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e.V. Bautzner Landstrasse 400, 01328 Dresden		Förderkennzeichen: 02 E 12052A
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Konkurrenz und Reversibilität bei Sorptionsvorgängen (KuRSiv), Teilprojekt A		
Zuordnung zum FuE-Programm: C1.1 Geowissenschaftliche und geotechnische Methoden zur Standorterkundung (Feld und Labor) C1.3 Methodische Grundlagen eines Standortvergleichs		
Laufzeit des Vorhabens: 01.01.2023 bis 30.06.2026	Berichtszeitraum: 01.07.2024 bis 31.12.2024	
Gesamtkosten des Vorhabens: 557.539,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Vinzenz Brendler	

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

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

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP2: Aufreinigung der Al-26 Lösung
 Untersuchungen der kompetitiven Sorption von Al^{3+} und Eu^{3+} an Hämatit mit unterschiedlichen Konzentrationen und Zeitpunkten der Zugabe der verschiedenen Ionen zeigten keinen Einfluss des Matrixelements Al auf die Sorption von Eu
 Umfassende Charakterisierung des Ausgangsmaterials Korund. Untersuchungen zur Sorption von Fe^{3+} an Korund waren aufgrund der zu geringen Löslichkeit des Eisens nicht möglich
 Untersuchungen zur Sorption von Eu^{3+} (1 μM) und Ga^{3+} (1 μM) an Korund zeigten Absorptionskanten bei pH \sim 6 (Eu^{3+}) und pH \sim 3 (Ga^{3+}).
- AP3: Reflektivitätsmessungen höherer Th-Konzentrationen in Abwesenheit von Nitrat wurden weiter ausgewertet. AFM-Untersuchungen von Al auf Orthoklas wurden bei verschiedenen pH-Werten (4, 5.5, und 7) in der Universität Durham gemeinsam mit Professor Kislun Voitchovsky durchgeführt.
- AP5: Erste thermodynamische Modellierung zur Sorption von Ga^{3+} an Hämatit. Untersuchung möglicher Al-Sekundärphasen an K-Feldspat wurden mit verschiedenen Methoden (Al-NMR, XPS) durchgeführt.

4. Geplante Weiterarbeiten

- AP2: Sorptionsversuche mit Al-26 an K-Feldspat.
 EXAFS-Untersuchungen zur Struktur gebildeter Ga-Oberflächenkomplexe (Messzeit Mitte Februar)
 Aufnahme von Isothermen für die Sorption von Al^{3+} und Ga^{3+} an Hämatit.
 Anfertigung diverser Manuskripte.
- AP3: Auswertung der Reflektivitätsmessungen sowie AFM-Messungen in Kombination mit Kraftmessungen. Anfertigung eines Manuskripts.
- AP5: Aufbauend auf den Ergebnissen der EXAFS Messungen Entwicklung eines thermodynamischen Modells zur Sorption von Ga^{3+} als Analog für Al^{3+} an Hämatit.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Lessing, J., Neumann, J., Henning C. Eng P., Stubbs J., Brendler, V., Stumpf, T., Schmidt, M. "Influence of Al on the Retention of Trivalent Actinides and their Homologues on Feldspar". Vortrag, 10th International Conference on Nuclear and Radiochemistry (NRC), 25.-30.08.2024, Brighton, UK.

Lessing, J., Neumann, J., Henning C. Eng P., Stubbs J., Brendler, V., Stumpf, T., Schmidt, M. "Einfluss von Al auf die Rückhaltung von dreiwertigen Aktiniden an Feldspat". Vortrag, Jahrestagung der Fachgruppe Nuklearchemie 2024 (GDCh), 05.-07.11.2024, Karlsruhe, Deutschland.

Hilpmann, S., Lessing, J., Schmidt, M., Brendler, V. "Influence of aluminum on the sorption of europium onto hematite surfaces" Posterbeitrag, 10th International Conference on Nuclear and Radiochemistry (NRC) 25.-30.08.2024, Brighton, Großbritannien

Hilpmann, S., Lessing, J., Schmidt, M., Brendler, V. „Kompetitive Sorption von Aluminium und Europium an Hämatit“ Posterbeitrag, GDCh Fachgruppentagung Nuklearchemie, 05.11.-07.11.2024, Karlsruhe, Deutschland

Hilpmann, S., Lessing, J., Schmidt, M., Brendler, V. "Competitive sorption of aluminum and europium onto hematite" Posterbeitrag, 6th International Conference on Radioecology & Environmental Radioactivity (ICRE)R, 24.-29.11.2024, Marseille, Frankreich

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 12052B
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Konkurrenz und Reversibilität bei Sorptionsvorgängen (KuRSiv), Teilprojekt B		
Zuordnung zum FuE-Programm: C1.1 Geowissenschaftliche und geotechnische Methoden zur Standorterkundung (Feld und Labor) C1.3 Methodische Grundlagen eines Standortvergleichs		
Laufzeit des Vorhabens: 01.01.2023 bis 30.09.2026	Berichtszeitraum: 01.07.2024 bis 31.12.2024	
Gesamtkosten des Vorhabens: 765.859,00 EUR	Projektleiter: Dr. Julian Fricke	

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

AP 1: State-of-the-Art: Bewertung

AP 2: Kompetitive Effekte

AP 3: Oberflächenausfällungen

AP 4: Oberflächenpotential und –ladung (ohne direkte HZDR-Beteiligung)

AP 5: Thermodynamische Daten & Modell

AP 6: Proof-of-Concept

AP 7: Koordination, Wissenstransfer

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP2/3: Beauftragte Partikelgrößenanalysen beim Institut für Partikeltechnik der TU Braunschweig zeigten u. a., dass für die Abtrennung von Partikel $< 20 \mu\text{m}$ Nasssiebungen erforderlich sind.

BET-Analysen bei der GRS von Orthoklas- und Oligoklasproben vom HZDR zeigten eine gute Übereinstimmung mit den vom HZDR zuvor bestimmten Werten.

Durchführung zahlreicher Batchsorptionsversuche. Das abweichende Sorptionsverhalten von Eu an Albit gegenüber anderen Feldspäten wurde bestätigt. Das Sorptionsverhalten von gemahlenem Quarz G20 EAS extra ($20\text{-}63 \mu\text{m}$) ist unterschiedlich zum Ausgangsmaterial ($150\text{-}850 \mu\text{m}$). Sorptionsdaten von Eu und MIN-U-SIL 5 zeigen vergleichbares Ergebnis zu Literaturdaten.

Mittels Säurebehandlung des Quarz G20 EAS extra konnte die Al Hintergrundbelastung in Batchversuchen erheblich reduziert werden. Experimente zur Sorptionskonkurrenz von Al und Eu geben Hinweise auf kompetitive Effekte auf die Sorption von Eu im niedrigen pH Bereich.

AP 4: Abschluss der Feststofftitrationen mit Orthoklas ($< 63 \mu\text{m}$) unter verschiedenen geochemischen Randbedingungen. Erste Auswertung der Daten.

AP 5: Die Planung des Workshops zur thermodynamischen Modellierung von Oberflächenprozessen wurde weiter konkretisiert. Der Workshop wird in Braunschweig bei der GRS vom 12.05.-14.05.2025 stattfinden. Ein Flyer wurde erstellt.

AP7: Es wurde ein Pflichtpraktikum betreut. Es wurden zwei Vorträge auf dem „Sorption data management and database development for radioactive waste management“ Workshop in Barcelona (Amphos 21) zu den Sessions „Research Trends“ und „Knowledge Management“ gehalten. Das dritte Arbeitstreffen hat am 04.11.2024 beim KIT-INE stattgefunden. Der Lehrauftrag an der TU Clausthal wurde erfolgreich abgeschlossen.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP1: Konkretisierung der Arbeiten zum SotA-Bericht in enger Zusammenarbeit mit allen Partnern.

AP2/3: Weitergehende Untersuchungen zum abweichenden Sorptionsverhalten von Albit zu anderen Feldspäten.

Es sind weitere Batchsorptionsexperimente zur Sorption von Al an Quarz und zur Untersuchung der kompetitiven Sorption von Al und Eu geplant.

Es sind Säulenversuche mit Al und Quarz sowie K-Feldspat geplant, um unter Einbeziehung der Batchsorptionsdaten Oberflächenkomplexparameter abzuleiten und zu evaluieren.

Durchführung von potentiometrischen Titrationen mit Quarz (G20 EAS extra, $< 63 \mu\text{m}$) und Auswertung der Orthoklas $< 63 \mu\text{m}$ Titrationsdaten mit PHREEQC.

AP5: Durchführung des „Workshop on thermodynamic modeling“.

AP7: Es ist ein weiterer Lehrauftrag bei der TU Clausthal für das SoSe 2025 geplant. Ab April 2025 wird eine MSc-Arbeit im Rahmen des Vorhabens angefertigt.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Karlsruher Institut für Technologie (Großforschungsaufgabe)		Förderkennzeichen: 02 E 12052C
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Konkurrenz und Reversibilität bei Sorptionsvorgängen (KuRSiv), Teilprojekt C		
Zuordnung zum FuE-Programm: C1.3 Methodische Grundlagen eines Standortvergleichs		
Laufzeit des Vorhabens: 01.01.2023 bis 30.06.2026	Berichtszeitraum: 01.07.2024 bis 31.12.2024	
Gesamtkosten des Vorhabens: 473.763,00 EUR	Projektleiter: Dr. Johannes Lützenkirchen	

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

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

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Die Arbeiten zur Bestätigung von Literaturdaten wurden fortgesetzt. Dabei wurden Probleme im Zusammenhang mit Pump-Vorgängen und Gas-Entwicklung gelöst. Das Umschalten von einer Lösung zu einer anderen, welches bei der bisherigen Vorgehensweise zu peaks führte, wird jetzt mit einem automatischen Ventil-System ausgeführt. Gleichzeitig wird mit der neuen Vorgehensweise die Bildung von Gasblasen unterbunden, die zuvor beobachtet werden konnten. Grundsätzlich liessen sich so die Literaturdaten bestätigen, wobei sich in beiden Datensätzen kein eindeutiger steady-state bei der Adsorption von gelöstem Al auf SiO₂-beschichteten Sensoren beobachten liess. Für gleiche Bedingungen wurde relativ zu den Literatur-Daten in etwa die Hälfte adsorbiertes Aluminium beobachtet. Nach den langwierigen Test-Versuchen ist somit die Versuchsanlage soweit eingestellt, dass die Durchführung der Versuche mit verschiedenen Eingangslösungen möglich ist. Zudem wurde eine pH-Elektrode für geringe Volumina getestet. Diese ermöglicht die Überprüfung von pH-Werten nach Kontakt der Lösung mit der Probe. In den Versuchen wurde zudem eine Analyse-Reihe für gelöstes Aluminium und Silizium durchgeführt. Im Weiteren wurden Messungen mit den inzwischen erhaltenen Feldspat-Proben durchgeführt. Diese sind sehr teuer und wurden daher mit Bedacht eingesetzt. Zunächst wurden Sensoren mittels XRD und SEM untersucht, um die Kristallinität und homogene Bedeckung der Sensoren mit Feldspat zu überprüfen. Die folgenden Versuche mit der QCM dienten der Überprüfung der Stabilität der Sensoren bei verschiedenen Bedingungen. Es konnte ein Masseverlust der Proben nachgewiesen werden, was auf Auflösungsprozesse hinweist. Die resultierenden Lösungen wurden für drei EingangspH-Werte zu verschiedenen Zeiten auf Si, Al und K per ICP analysiert. Die Daten deuten eine pH-Abhängigkeit der Auflösung an, wobei im neutralen pH Bereich ein Minimum auftritt. Zudem wurde bei konstantem EingangspH-Wert der Einfluss der Na Konzentration untersucht. Die Ergebnisse zeigen eine Zunahme der Auflösung mit zunehmender Na-Konzentration. Ähnliche Ergebnisse wurden mit K-haltigen Lösungen erhalten. Ausgewählte Proben wurden per XRD und XPS vor und nach den Durchflussversuchen untersucht. Die Ergebnisse waren im Einklang mit den ICP Ergebnissen. Erste Versuche zur Al-Wechselwirkung mit diesen QCM-Sensoren bei pH 4 zeigten eine Zunahme der Masse (also Aluminium-Adsorption). Die Prozesse waren weitgehend reversibel. Adsorptionsversuchen mit Europium wurden ebenfalls durchgeführt, wobei in erster Linie zunächst Detektion-Grenzen ermittelt werden sollten. Während höhere Al-Konzentrationen durchaus realistisch sind, sollte Eu bei relativ niedrigeren Konzentrationen vorliegen. Der Einfluss von 1 mM Eu in der Ausgangslösung war nur noch schwer zu beobachten (pH 5.5). Eine pH-Erhöhung kann die Situation vermutlich verbessern.

Strömungspotentialmessungen wurden mit runden QCM Proben durchgeführt. Dazu wurden neu entwickelte Probenhalter verwendet, die wesentlich bessere Ergebnisse lieferten als die konventionellen. Diese Probenhalter sollen auch für die geplanten gekoppelten QCM/Strömungspotential-Messungen verwendet werden. Um möglichst wenige Sensoren zu verbrauchen, wurden die Tests mit Gold-Sensoren durchgeführt. Ein erster Gold-Sensor für eine gekoppelte Messung wurde hergestellt.

4. Geplante Weiterarbeiten

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

AP4: Bestimmung einer Gleichgewichtslösung für die Feldspat-Sensoren. Aus den Vorversuchen, die eine Auflösung des Feldspat-coatings zeigten, wurde entschieden, dass aufgrund der hohen Kosten der Sensoren die Durchführung unter Gleichgewichtsbedingungen vorzuziehen ist, so dass einerseits Zeit für die Vorequilibration gespart werden kann und möglicherweise auch Sensoren für mehr als nur eine Messung verwendet werden können. Gleichgewichtsbedingungen sollen für verschiedene pH-Werte bestimmt werden. Es wird noch diskutiert, welche Bedingungen und Lösungsvolumina gewählt werden können/müssen. Es wird angestrebt, gekoppelte QCM/Strömungspotentialversuche mit dem Gold-Sensor-Prototypen durchzuführen. Dies soll nach den obigen Versuchen in enger Kooperation mit Vacuum Science geschehen. Es

wird überlegt, über eine Kooperation eine Theorie für die Strömungspotential-Messungen an den runden QCM-Sensoren zu entwickeln.

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

5. Berichte, Veröffentlichungen

keine

Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer: Technische Universität Darmstadt, Institut für Angewandte Geowissenschaften, Fachgebiet Ingenieurgeologie, Schnittspahnstraße 9, 64287 Darmstadt		Förderkennzeichen: 02 E 12062A
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Spannungsprognosen – Quantifizierung und Reduzierung von Ungewissheiten mit geomechanisch-numerischen Untergrundmodellen (SQaRe), Teilprojekt A: Ungewissheiten durch Materialparameter, Diskretisierung, Initial- und Randbedingungen		
Zuordnung zum FuE-Programm: C1.1 Geowissenschaftliche und geotechnische Methoden zur Standorterkundung (Feld und Labor)		
Laufzeit des Vorhabens: 01.01.2023 bis 31.12.2025	Berichtszeitraum: 01.07.2024 bis 31.12.2024	
Gesamtkosten des Vorhabens: 258.500,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Andreas Henk	

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

Die Arbeiten sind auf fünf Arbeitspakete (AP) entsprechend der spezifischen Expertise der drei Projektpartner verteilt. Das Arbeitspaket AP1, an dem alle mitarbeiten, bildet den Rahmen der Arbeitspakete AP2-AP4, in denen jeweils Teilaspekte der Ungewissheiten eines geomechanisch-numerischen Modells betrachtet werden. AP1 dient zur Integration der verschiedenen Modellierungskonzepte zur Quantifizierung der gesamten Modellungsgewissheiten und zur Entwicklung von geeigneten Beprobungsstrategien zu deren Reduzierung. AP2 an der RWTH Aachen fokussiert auf die Ungewissheiten in den geologischen Strukturen, d.h. auf die Modellgeometrie. AP3 an der TU Darmstadt untersucht den Einfluss durch die räumliche Verteilung der Gesteinseigenschaften, die Rechengitterauflösung sowie die Initial- und Randbedingungen. AP4 am GFZ Potsdam konzentriert sich auf den Einfluss der Modellkalibrierungsdaten. In der finalen Projektphase erfolgt in AP5 eine Validierung des Modellierungskonzeptes und der entwickelten Modellierungswerkzeuge aus AP1-AP4 in Form einer Fallstudie an einem realen Datensatz und einem hoch aufgelösten Modell aus der Nordschweiz. An AP5 arbeiten ebenfalls alle Projektpartner gemeinsam.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Die im vorherigen Quartal durchgeführten Arbeiten zur Rechengitterauflösung der finite Element Modelle wurden ausgewertet. Aufbauend auf diesen generischen Studien zum Einfluss von Meshauflösung und unterschiedlichen Elementtypen wurde zusätzlich eine vergleichende Analyse bereits vorhandener Standortmodelle aus der Schweiz durchgeführt. Dazu wurden für den Standort Nördlich Lägern Modelle aus den Jahren 2013, 2020 und 2024 genutzt. Diese Modelle unterscheiden sich neben einer geringfügig anderen Modellgeometrie auch in der verwandten mechanischen Stratigraphie. So wurden z.B. in dem Modell von 2013 noch mehrere lithologische Einheiten zusammengefasst, die später getrennt berücksichtigt wurden. Der entscheidende Unterschied liegt aber in der Auflösung des Rechengitters von 0,27, 2,5 und 7,8 Mio. Elementen. Dies ermöglicht, die Einflussgröße der Rechengitterauflösung auch an realen Modellen zu untersuchen, indem jeweils aktuelle und identische Materialeigenschaften und Kalibrierungsdaten (Spannungsmagnituden) auf alle Modelle angewandt werden. Dies unterscheidet sich insofern von den bereits existierenden Modellen, da für diese teilweise stark abweichende Materialeigenschaften verwendet wurden, je nach dem Kenntnisstand und den verfügbaren Bohrungen zum Erstellungszeitpunkt.

Weiterhin erfolgten Zuarbeiten zu den Arbeitspaketen der anderen Arbeitsgruppen. Für AP 5 wurde eine Modellvariante von Nördlich Lägern (NL2024), gänzlich ohne Kontaktelemente erstellt, damit die „reduced basis“-Methode jetzt auch an hochauflösenden Modellen getestet werden kann. Dies ist notwendig, da in der verwendeten Software keine Kontakte verwendet werden können. Für AP 4 erfolgten Zuarbeiten zu einem anderem Standortmodell.

4. Geplante Weiterarbeiten

Es wird weiter an der Vorbereitung von Publikationen gearbeitet, die sich mit dem Einfluss von Rechengitterauflösung und Elementtyp auf der Basis generischer als auch von Standortmodellen beschäftigen. Zu diesem Themenfeld werden Beiträge für die Konferenzen EGU (Wien), als auch die safeND (Berlin) erfolgen. Weiterhin liegt der wissenschaftliche Fokus auf der Zusammenfassung von mehreren Lithologien zu einer mechanischen Einheit, als auch der Skalierung von Materialparametern zwischen gesteins- und gebirgsmechanischen Kennwerten. Dazu ist noch weitere Literaturrecherchen, als auch zusätzliche Tests mittels generischer Modelle notwendig.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Im Berichtszeitraum erfolgte die Veröffentlichung des Pre-Prints des Artikels zur „reduced basis“-Methode (AP2) in Solid Earth/EGUsphere. Konferenzbeiträge erfolgten nicht, da bereits im vorherigen Halbjahr (1. HJ 2024) mehrere Vorträge gehalten wurden.

Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer: Helmholtz Zentrum Potsdam Deutsches GeoForschungsZentrum GFZ, Telegrafenberg, 14473 Potsdam		Förderkennzeichen: 02 E 12062B
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Spannungsprognosen - Quantifizierung und Reduzierung von Ungewissheiten mit geomechanisch-numerischen Untergrundmodellen (SQuaRe). Teilprojekt B: Bayesischer Ansatz zur Kalibrierung geomechanisch-numerischer Modelle mit Reduzierung der Ungewissheiten		
Zuordnung zum FuE-Programm: C1.1 Geowissenschaftliche und geotechnische Methoden zur Standorterkundung (Feld und Labor) C1.2 Charakterisierung des Geosystems und Geosynthese		
Laufzeit des Vorhabens: 01.01.2023 bis 31.12.2025	Berichtszeitraum: 01.07.2024 bis 31.12.2024	
Gesamtkosten des Vorhabens: 366.885,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Oliver Heidbach	

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

Die Arbeiten sind auf fünf Arbeitspakete (AP) entsprechend der spezifischen Expertise der drei Projektpartner verteilt. Das Arbeitspaket AP1, an dem alle mitarbeiten, bildet den Rahmen der Arbeitspakete AP2-AP4, in denen jeweils Teilaspekte der Ungewissheiten eines geomechanisch-numerischen Modells betrachtet werden. AP1 dient zur Integration der verschiedenen Modellierungskonzepte zur Quantifizierung der gesamten Modellungsgewissheiten und zur Entwicklung von geeigneten Beprobungsstrategien zu deren Reduzierung. AP2 an der RWTH Aachen fokussiert auf die Ungewissheiten in den geologischen Strukturen, d.h. auf die Modellgeometrie. AP3 an der TU Darmstadt untersucht den Einfluss durch die räumliche Verteilung der Gesteinseigenschaften, die Rechengitterauflösung sowie die Initial- und Randbedingungen. AP4 am GFZ Potsdam konzentriert sich auf den Einfluss der Modellkalibrierungsdaten. In der finalen Projektphase erfolgt in AP5 eine Validierung des Modellierungskonzeptes und der entwickelten Modellierungswerkzeuge aus AP1-AP4 in Form einer Fallstudie an einem realen Datensatz und einem hoch aufgelösten Modell aus der Nordschweiz. An AP5 arbeiten ebenfalls alle Projektpartner gemeinsam.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im Rahmen des dritten SQUARE Workshops Mitte Juni 2024 am GFZ Potsdam lag der Fokus auf der Diskussion der Ergebnisse zur Erstellung des generischen Referenzmodells für AP1. Es konnten einige technische Hürden bzw. Fehler identifiziert und im 2. Halbjahr 2024 gelöst werden. Die finalen Ergebnisse zeigen, dass sich ein Ersatzmodell für das generische geomechanisch-numerische Modell erstellen lässt, dass in Bezug auf die Rechengeschwindigkeit um 5-6 Größenordnung schneller ist bei gleicher Präzision der Ergebnisse. Diese grundlegende Arbeit wurde im 2. Halbjahr als Publikation beim Open Access Journal der EGU Solid Earth eingereicht und befindet sich derzeit im Review-Prozess.

Ein zweiter Arbeitsschritt der im Berichtszeitraum umgesetzt wurde, waren grundlegende Programmierarbeiten, die es erlauben den Beitrag der Modellkalibrierungsdaten (Daten zu den Magnituden der kleinsten und größten Horizontalspannung) zu den Ungewissheiten der Modellprognose statistisch zu quantifizieren. Bei der Programmierung wurden drei Aspekte einbezogen: a) Wieviele Daten sind notwendig, um robuste Modellergebnisse zu erhalten, oder anders ausgedrückt: Was ist die minimale Anzahl von Kalibrierungsdaten, die man braucht. b) Beitrag auf die Modellunsicherheiten durch Modell-Kalibrierungsdatenpunkten, die entweder nicht repräsentativ für ein größeres Gesteinsvolumen sind, oder die (unwissentlich) fehlerbehaftet sind z.B. aufgrund von Messfehlern, oder nicht sauber durchgeführter Analyse der Messungen. c) Einfluss der Messungenauigkeiten in den Modellkalibrierungsdaten. Oft werden nur Messpunkte angegeben obwohl die Messungen die Magnituden der kleinsten und größten Horizontalspannung einen Bereich angeben der physikalische möglich ist. Diese individuellen Messungenauigkeiten müssen bei der Quantifizierung der Modellunsicherheiten bezüglich der Modellkalibrierungsdaten ebenfalls erfasst werden.

Die Entwicklung des technischen Workflows zu Punkt a) wurde abgeschlossen und mit verschiedenen Datensätzen getestet. Fehler wurden eliminiert und eine Struktur der Publikation der Ergebnisse vorbereitet. Parallel hierzu wurde das Tool **DOUGLAS (Detection of Outliers in Geomechanics using Linear-elastic Assumption and Statistics)** entwickelt, das Ausreißer Kalibrierungsdatensatz identifizieren kann und Punkt b) adressiert. Das Python-basiert Tool wurde getestet und für eine Publikation vorbereitet.

4. Geplante Weiterarbeiten

Fokus der Arbeiten im ersten Halbjahr 2025 sind:

- Publikation der Ergebnisse in einem internationalen peer-reviewed Journal
- Veröffentlichung von DOUGLAS (Code & Manual als WSM Technical Report mit DOI)
- Durchführung des vierten SQUARE Workshop im Februar 2025 am GFZ Potsdam
- Vorstellung der Ergebnisse auf der EGU Tagung in Wien im April 2025

5. Berichte, Veröffentlichungen

Bisher liegen noch keine Berichte oder Veröffentlichungen vor.

Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer: RWTH Aachen University		Förderkennzeichen: 02 E 12062C
Vorhabensbezeichnung: Spannungsprognosen – Quantifizierung und Reduzierung von Ungewissheiten mit geomechanischnumerischen Untergrundmodellen (SQuaRe) – Teilprojekt C		
Zuordnung zum FuE-Programm: C1.1 Geowissenschaftliche und geotechnische Methoden zur Standorterkundung (Feld und		
Laufzeit des Vorhabens: 01.12.2022 bis 30.11.2025	Berichtszeitraum: 01.07.2024 bis 31.12.2024	
Gesamtkosten des Vorhabens: 244.990,24 EUR	Projektleiter: Jan Florian Wellmann	

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

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

Arbeiten liegt in AP 2 mit der systematischen Betrachtung von geometrischen Parametern auf die Ungewissheiten einer Spannungsprognose. Unter Verwendung des open-source Softwarepaketes GemPy werden einfache geologische Modelle erstellt und mit Hilfe weiterer open-source Pakete diskretisiert um dann für Spannungsprognosen verwendet werden zu können. Es wird untersucht welche Art von geometrischen Ungewissheiten den größten Einfluss auf die Spannungsprognosen hat. Desweiteren werden Ersatzmodelle mit Hilfe eines physikbasierten maschinellen Lernansatzes erstellt, um die Berechnung der Ungewissheiten der Spannungsprognosen zu ermöglichen. Dieser Schritt ist notwendig, da die einzelnen Simulationen eine zu lange Laufzeit haben um eine Ungewissheitsanalyse durchzuführen. In diesem Schritt liegt der Hauptfokus auf der Anwendung und Entwicklung von Methoden, die die physikalischen Eigenschaften der Modelle erhalten.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im Rahmen der globalen Sensitivitätsstudien wurde festgestellt, dass die Ergebnisse maßgeblich durch das gewählte Kostenfunktional beeinflusst werden. Dieses bestimmt, in welchem Aspekt die Sensitivität analysiert wird. Zur Ermöglichung der Anwendung globaler Sensitivitätsanalysen im Endlagerbereich wurden diese Einflüsse systematisch analysiert und Strategien für den Einsatz im Endlagerbereich entwickelt. Zudem wurde die Integration der aktuellen Ersatzmodelle in probabilistische Unsicherheitsanalysen vorbereitet. Der bisherige Erkenntnisgewinn wurde genutzt, um ein generelles Vorgehen für die Fallstudie in der Schweiz zu konzipieren. Dies trägt zur Quantifizierung von Unsicherheiten und zur Verbesserung der Vorhersagen der Spannungszustände im Endlagerbereich bei.

Gemeinsam mit den Projektpartnern wurde eine Publikation zu einem der Kernthemen des Projektes erstellt: der Frage der Genauigkeit von Ersatzmodellen für geomechanische Simulationen. Der Artikel mit dem Titel „About the Trustworthiness of Physics-Based Machine Learning – Considerations for Geomechanical Applications“ wurde eingereicht und ist momentan im Review.

4. Geplante Weiterarbeiten

In der nächsten Phase werden, in enger Abstimmung mit den Projektpartnern, weitere Ersatzmodelle erstellt – sowohl für den gesamten 3-D Simulationsraum, als auch für spezifische Spannungsvorhersagen an der Lokation der Bohrungen. Dabei ist insbesondere vorgesehen, den Bereich der Randbedingungen und der Gesteinseigenschaften anhand der (ungewissen) Messungen in den Bohrlöchern zu invertieren. Weiterhin werden weitere geomechanische Modelle erstellt, um Zusammenhänge zwischen Randbedingungen und den Spannungsfeldern um Störungen zu analysieren.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Es wurde ein Manuskript mit dem Titel „About the Trustworthiness of Physics-Based Machine Learning – Considerations for Geomechanical Applications“ für das Journal „Solid Earth“ eingereicht. Nach „minor revisions“ ist es momentan wieder im Review. Für die Konferenz „European Geosciences Union General Assmebly 2025“ wurde ein Beitrag mit dem Titel „Global Sensitivity Analysis to Improve Geomechanical Stress Characterizations Using Physics-Based Machine Learning Models“ eingereicht.

Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer: Technische Universität Bergakademie Freiberg, Akademiestr. 6, 09599 Freiberg	Förderkennzeichen: 02 E 12072A
Vorhabensbezeichnung: MgO-Beton C3 als langzeitbeständiges und schnellwirksames Verschlusselement für Schachtverschlüsse zukünftiger HAW-Endlager im Salinar (MgO-C3), Teilprojekt A	
Zuordnung zum FuE-Programm: C2.3 Geotechnische und technische Barrieren	
Laufzeit des Vorhabens: 01.12.2022 bis 30.11.2025	Berichtszeitraum: 01.07.2024 bis 31.12.2024
Gesamtkosten des Vorhabens: 694.407,00 EUR	Projektleiter: Dr. Daniela Freyer

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

AP1: Weiterer Verlauf der Kontaktdruckentwicklung

AP2: Untersuchung der Schwankungsbreite der C3-Rezeptur

AP3: Neuformulierung der Rezeptur

AP4: Berichtserstellung

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

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1: Das Monitoring des in-situ-Großbohrlochversuchs (MgO-Beton C3) in der Grube Teutschenthal wurde fortgesetzt (alle Spannungen, Temperatur, Standortfeuchte). Nach inzwischen etwa 6 Jahren (ca. 2200 Tage) haben die radialen Kontaktdrücke nun sicher ein konstantes Niveau erreicht (4,0 – 4,5 MPa). Der Versuchsstand sowie die Messeinrichtung des Feuchte-Monitorings für die geplante Lösungsdruckbeaufschlagung sind vor Ort installiert. Die Nullmessung (Istzustand vor der Lösungsdruckbeaufschlagung) ist erfolgt.

AP2: Das neu-gestartete Labor-Monitoringprogramm (Druck, Phasenbestand, Temperatur) wurde weitergeführt. Die Phasenbestandsentwicklung wurde an kiesfreien Proben entspr. RV3, welche ebenso die TZF durchlaufen sind, quantifiziert. Es wird primär die 5-1-8-Phase gebildet, welche später in die 3-1-8-Phase (unter Verbrauch von Rest-Porenlösung) umkristallisiert. Dieser Prozess ist verbunden mit einem sekundären Druckanstieg (= Expansionsdruck). Bei allen RV ist die Phasenbestandsentwicklung in den beiden TZF gleich. Die Höhe des Druckanstieges hängt vom Kieszuschlagsanteil ab. Der höchste Druckanstieg ist bei RV1 (min. Kiesanteil) und der geringste p-Anstieg bei RV4 (max. Kiesanteil) zu beobachten. Gefüge-untersuchungen mittels CT-Messungen zeigen einen systematisch höheren Luftporenanteil mit steigendem Kiesanteil (RV4 höher als RV1), worin die Druckentwicklung durch die Sekundärkristallisation der 3-1-8-Phase verloren geht.

AP3: Das Labor-Monitoringprogramm (Druck, Phasenbestand, Temperatur) wurde fortgeführt. Die Druck- und Phasenbestandsentwicklungen verlaufen entsprechend RV3 (s. AP2).

4. Geplante Weiterarbeiten

AP1: Fortsetzung des in-situ-Großbohrlochversuch-Monitorings (alle Spannungen, Temperatur, Standortfeuchte).

Beginn der Lösungsdruckbeaufschlagung im 1. Quartal 2025, nachdem sich nunmehr ein konstanter Kontaktdruck zwischen Bauwerk und Gebirge eingestellt hat. Es wird von einer mind. 1-jährigen Versuchszeit ausgegangen mit anschließender Datenauswertung.

AP2: Fortsetzung Labor-Monitoring-Programm (Druck, Phasenbestand, Temperatur), Quantifizierung des Bindemittelphasenbestandes im jeweiligen TZF sowie CT-Messungen.

AP3: Fortsetzung Labor-Monitoring-Programm (Druck, Phasenbestand, Temperatur) sowie Quantifizierung des Bindemittelphasenbestandes im jeweiligen TZF.

5. Berichte, Veröffentlichungen

- keine

Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer: Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e.V., Bautzner Landstr. 400, 01328 Dresden		Förderkennzeichen: 02 E 12072B
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: MgO-Beton C3 als langzeitbeständiges und schnellwirksames Verschluss- element für Schachtverschlüsse zukünftiger HAW-Endlager im Salinar (NgO-C3), Teilprojekt B		
Zuordnung zum FuE-Programm: C2.3 Geotechnische und technische Barrieren		
Laufzeit des Vorhabens: 01.12.2022 bis 30.11.2025	Berichtszeitraum: 01.07.2024 bis 31.12.2024	
Gesamtkosten des Vorhabens: 36.856,00 EUR	Projektleiter: Dr. Johannes Kulenkampff	

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

Hauptvorhaben:

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

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

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP2.5/ μ CT-Aufnahmen an Proben mit Rezepturvarianten 1-4, LV und All.

3.3 Quantitative 3D-Bildanalyse.

Die Ergebnisse der neu untersuchten Proben reihen sich systematisch in die bisher gewonnenen Ergebnisse ein.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP2.5 Vergleichsaufnahmen mit Bohrkernen aus geomechanischer Untersuchung zwecks direkter Korrelation der Ergebnisse, sowie an Bohrkernen aus GBLV II.

5. Berichte, Veröffentlichungen

keine

Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer: TU Clausthal – Lehrstuhl für Geomechanik und multiphysikalische Systeme		Förderkennzeichen: 02 E 12082
Vorhabensbezeichnung: Langzeitsicheres Abdichtungselement aus Salzschnittblöcken - Durchführung, Auswertung und Reanalyse von THM-Versuchen unter triaxialer Extensionsbeanspruchung (SSBVIER)		
Zuordnung zu den FuE-Feldern des Förderprogramms: C2.3 Geotechnische und technische Barrieren		
Laufzeit des Vorhabens: 01.01.2023 bis 30.06.2025		Berichtszeitraum: 01.07.2024 bis 31.12.2024
Gesamtkosten des Vorhabens: 243.874,00 EUR		Projektleiter: Dr.-Ing. Ralf Wolters-Zhao

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 (02 E 11708D und 02 E 11951D) erarbeiteten Ergebnisse zur stoffmodelltheoretischen Charakterisierung von Salzgrus integriert.

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

- AP 1 Beschaffung von gewachsenem Steinsalz
- AP 2 Herstellung von Steinsalzschnittblöcken
- AP 3 Herstellung eines Salzbetonhohlzylinders
- AP 4 Durchführung und Auswertung von Technikumsversuchen unter variierten THM-Belastungen mit nachfolgender Analyse der hydraulischen Eigenschaften
- AP 5 Rechnerische Reanalyse der Technikumsversuche mit Verifikation und Validation und ggf. Ertüchtigung des Berechnungsinstrumentariums
- AP 6 Erstellung Schlussbericht

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP 1: Die Beschaffung von gewachsenem Steinsalz ist bereits vor Beginn des Berichtszeitraums abgeschlossen worden.
- AP 2: Die Herstellung von Salzschnittblöcken für einen vierten Prüfkörper mit einem Durchmesser von 0,55 m und einer Höhe von 1,5 m sowie mit einer Fugenbreite von 0,1 mm (ohne Salzgrusfugenfüllung) in einem Salzbetonhohlzylinder ist abgeschlossen worden.
- AP 3: Der Salzbetonhohlzylinder ist vom Hersteller geliefert worden. Dieser weist einen Außendurchmesser von 0,75 m und eine Wandstärke von lediglich 5 cm anstatt der geplanten Wandstärke von 10 cm auf.
- AP 4: - Die Durchführung des dritten Prüfkörpertests mit Konfiguration der Salzschnittblock-Konstruktion mit einer Fugenbreite von 5 mm und Salzgrusfugenfüllung sowie die zugehörige Analyse der Permeabilität für variierte mechanische und hydraulische Beanspruchungen ist abgeschlossen worden.
- Der Aufbau eines vierten Prüfkörpers mit einem Durchmesser von 0,55 m und einer Höhe von 1,5 m sowie mit einer Fugenbreite von 0,1 mm (ohne Salzgrusfugenfüllung) in einem Salzbetonhohlzylinder ist begonnen worden.
- AP 5: Die numerische Reanalyse des dritten Prüfkörpertests mit Konfiguration der Salzschnittblock-Konstruktion mit einer Fugenbreite von 5 mm und Salzgrusfugenfüllung ist fortgesetzt worden.
- AP 6: Mit der Erstellung des Schlussberichts ist begonnen worden.

4. Geplante Weiterarbeiten

- AP 1: -
- AP 2: -
- AP 3: -
- AP 4: Durchführung des vierten Prüfkörpertests (Prüfkörper in einem Salzbetonhohlzylinder)
- AP 5: Numerische Reanalyse des dritten und vierten Prüfkörpertests
- AP 6: Erstellung des Schlussberichts

5. Berichte, Veröffentlichungen

Düsterloh, U.; Lerche, S.; Zhao, J. (2023): Pilot plant tests to demonstrate the functionality of sealing elements made of salt cut bricks, Poster Projektstatusgespräch 2023, Karlsruhe, 06.11.2023 – 07.11.2023.

Düsterloh, U.; Lerche, S.; Zhao, J. (2024): Langzeitsicheres Abdichtungselement aus Salzschnittblöcken - Durchführung, Auswertung und Reanalyse von THM-Technikumsversuchen, 4. Tage der Standortauswahl, Goslar, 18./19. April 2024.

Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer: TU Braunschweig, Postfach 3329, 38023 Braunschweig		Förderkennzeichen: 02 E 12102
Vorhabensbezeichnung: Entwicklung einer selbstlernenden Modellierungsmethodik zu geomechanischen und geotechnischen Prozessen am Beispiel der Planungs- und Auffahrungsphase einer Einlagerungsstrecke eines Tiefenlagers (SEMOTI)		
Zuordnung zum FuE-Programm: C3.3. Werkzeuge der Sicherheitsanalysen		
Laufzeit des Vorhabens: 01.05.2023 bis 30.04.2026		Berichtszeitraum: 01.07.2024 bis 31.12.2024
Gesamtkosten des Vorhabens: 999.050,00 EUR		Projektleiter: Univ.-Prof. Dr.-Ing. J. Stahlmann

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

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

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

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

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

AP2: Erstellen eines virtuellen Demonstrators (IGG)

AP3: Parametrisierung des virtuellen Demonstrators (IGG)

AP4: Maschinelles Lernen mittels Gaußprozessen (IRMB, IDS)

AP5: Implementierung eines Optimierungsprozesses für die Planungsphase (IDS)

AP6: Implementierung eines Kalibrierungsprozesses für die Auffahrungsphase (IRMB)

AP7: Sensitivitätsbetrachtung (IGG, IRMB, IDS)

AP8: Administrative Arbeiten

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Der Workflow und die aktuellen Ergebnisse des Kalibrierungsprozesses für einen Messquerschnitt aus dem Salzstock Gorleben anhand von Konvergenzmessungen wurden in einem Paper „Gaussian Processes enabled model calibration in the context of deep geological disposal“ zusammengefasst. Die erste Revision seitens des Journals ist mittlerweile abgeschlossen, der Preprint wurde bereits auf arXiv veröffentlicht. (AP 2, 3, 4, 6 & 7)

Es wurde an der Implementierung einer adaptiven Sampling Methode innerhalb der Schleife für die Erstellung der Trainingsdaten gearbeitet, um Stützstellen mit größtmöglichem Informationsgewinn zu identifizieren und die Modellkalibrierung effizienter zu gestalten. Die Methodik wurde erfolgreich anhand eines 1D Beispiels getestet. (AP 6)

Weiterhin wurde die Entwicklung eines zeitabhängigen GPs-basierten Ersatzmodell betrachtet, welches eine Prognose einschließlich Unsicherheitsquantifizierung ermöglicht. Hierfür wird zurzeit ein Testbeispiel ausgearbeitet. (AP 4)

Von der BGE mbH wurde weitere Messdaten einer Strecke des Salzstocks Morsleben zur Verfügung gestellt. Neben kontinuierlichen Konvergenzmessungen beinhalten diese punktuelle Permeabilitätsmessungen von Bohrloch- und Oberflächenpackern. Da das Stoffmodell *TUBSSalt* für Steinsalz ebenfalls eine anisotrope Permeabilität berechnen kann, wurde anhand dieses Standortes und den zugehörigen Messungen ein weiterer Kalibrierungsprozess erfolgreich durchgeführt. In diesem Fall besteht das Ersatzmodell aus 8 Inputs (*TUBSSalt* Stoffmodellparameter) und 5 Outputs (Konvergenzen und Permeabilitäten). Die Ergebnisse wurden in einem Paper mit dem Titel „Machine-learning enabled model calibration in the context of digital twinning of an emplacement drift in rock salt“ für die Konferenz *SaltMech XI* (Juli 2025) zusammengestellt. (AP 6)

Auf Basis der Vorarbeiten für das Testszenario des Optimierungsprozesses wurde am IGG eine Studienarbeit mit dem Thema „Identifizierung von geometrischen Parametern zur Optimierung einer Einlagerungsstrecke mit Verschlussbauwerk im Wirtsgestein Steinsalz“ betreut, sodass nun plausible geometrische Parameter sowie zugehörige Wertebereich für den Optimierungsprozess vorliegen (AP 5).

Es wurden erste erfolgreiche Simulationen mit der Software FLAC3D auf dem TU-internen Hochleistungsrechner Phoenix durchgeführt, jedoch gibt es ein Problem bei der Einbindung des Stoffmodells *TUBSSalt* in die Linux-Umgebung des Hochleistungsrechners. (AP 5 & 6)

4. Geplante Weiterarbeiten

Implementierung der betrachteten Methoden (Adaptive Sampling Methode und zeitabhängiges GP-basiertes Ersatzmodell) in den bestehenden Workflow für den Kalibrierungsprozess, um diesen effizienter zu gestalten und die Prognosefähigkeit in Kombination mit Unsicherheitsquantifizierung zu ermöglichen. Dabei soll das adaptive Sampling zusammen mit der bisher verwendeten Quasi-Monte-Carlo-Simulation eingesetzt werden, um weiterhin eine aussagekräftige globale Sensitivitätsanalyse zu ermöglichen. (AP 6)

Weiterhin soll eine Erhöhung der Modellkomplexität erfolgen: Zum einen die Modellierung von Bohrlöchern zur Abbildung von Permeabilitätsmessungen mittels Bohrlochpackern und zum anderen die Berücksichtigung eines Verschlussbauwerks für die Entwicklung der Permeabilität für ein zukünftiges Szenario, in dem sich die Permeabilität durch Verheilung der Auflockerungszone im Steinsalz verringert. (AP 6)

Die Einbindung des Stoffmodells *TUBSSalt* in die Umgebung des Hochleistungsrechners wird weiterverfolgt. Ebenfalls wird die Nutzung eines *Message Passing Interface* (MPI) untersucht, um Rechenprozesse zu parallelisieren und somit zu beschleunigen. (AP 5 & 6)

Mit den nun identifizierten geometrischen Parametern und den Vorarbeiten zum Workflow des Optimierungsprozesses soll ein GP-basiertes Ersatzmodell erstellt und anhand der Permeabilität optimiert werden. (AP 5)

5. Berichte, Veröffentlichungen

Paul, L.; Urrea-Quintero, J.H.; Fiaz, U.; Hussein, A.; Yaghi, H.; Stahlmann, J.; Römer, U. & Wessels, H.: **Gaussian Processes enabled model calibration in the context of deep geological disposal.** arXiv:2409.02576 [physics.geo-ph], <https://doi.org/10.48550/arXiv.2409.02576>, 2024.

Zuwendungsempfänger: Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e.V., Bautzner Landstraße 400, 01328 Dresden		Förderkennzeichen: 02 E 12112A
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Systematic sensitivity analysis for mechanistic geochemical models using field data from crystalline rock (SANGUR), Teilprojekt A		
Zuordnung zum FuE-Programm: C3.1 Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-)Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung C3.3 Werkzeuge der Sicherheitsanalysen		
Laufzeit des Vorhabens: 01.02.2023 bis 31.01.2026	Berichtszeitraum: 01.07.2024 bis 31.12.2024	
Gesamtkosten des Vorhabens: 975.750,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Vinzenz Brendler	

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

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

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP1: Grundlagenarbeiten zur Globalen Sensitivitätsanalyse: Sensitivitätsmaße für Multivariate Ergebnisse basierend auf Optimaler Transport Theorie, Nutzung Spieltheoretischer Konzepte.
- AP2: Weiterentwicklung des Workflows zur Berechnung von smart K_d -Werten:
- Modul Lithologie: Verwendung von MLA-Daten von Lausitzer Granit-Dünnschliffen als Trainingsdaten, Simulation von exponierten Mineralzusammensetzungen entlang offener Wegsamkeiten (Risse) mittels Markow-Ketten.
 - Modul Geochemie: Erweiterung der TDB durch SCM Daten zu Biotit, Muskovit und Chlorit. Festlegung von geochemischen Analoga für Minerale ohne verfügbare SCM Daten.
 - Weiterentwicklung und Tests der Implementierung in Python für eine automatisierte Kombination von Feature Space Sampling für Sensitivitätsanalyse für eine strukturierte Variierung von Eingangsparametern, und der GWBplugin Nutzung.
- AP3: Definition der Wasserzusammensetzung für Lausitzer Granit. Untersuchung der mineralogischen Zusammensetzung mittels XRF/SEM. Abgeschlossene Äquilibrierungs-/Auslaugungstests mit gegebener Wasserzusammensetzung an Gesteinswürfeln und zerkleinertem Material mit verschiedenen pH-Puffern (5, 6, 8).
- AP5: Fortführung der Nutzertests der Toolbox zur Sensitivitätsanalyse
- AP7: Monatlich: Online-Meetings von HZDR, TUC und ÚJV (partiell auch mit SÚRAO)
30.9.-1.10.2024: Projekttreffen bei ÚJV Řež

4. Geplante Weiterarbeiten

- AP2: Anwendung der Entwickelten Simulationsmethoden (Truncated Plurigaussian Simulation & Markow-Ketten) auf die verfügbaren Lausitz Proben (Dünnschliffe). Ermittlung der mineralogischen Zusammensetzung an Wegsamkeiten und deren Streuung als Maß für Heterogenitäten. Weiterentwicklung von Implementierungen in Python Code.
- AP3: Imprägnierung von Gesteinswürfeln mit Fsc-Harz (HIF, Freiberg) zur Porenraumuntersuchung mittels Konfokalmikroskopie
- AP5: Anwendung der SA/UA-Toolbox für Realsysteme (Granit)
- AP7: Weiterführung der monatlichen Online-Meetings zwischen HZDR, TUC und ÚJV
Projektmeetings am HZDR und der TU Clausthal

5. Berichte, Veröffentlichungen

- Pospiech, S.; Duckstein, A.; Brendler, V.: *Integrating Chemical Modelling and Geostatistics for Improved Radionuclide Retention Models in Crystalline Rock*, GeoSaxonia 2024, 23.-26.09.2024, Dresden, Germany
- Duckstein, A.; Pospiech, S.; Brendler, V.; Bok, F.; Tolosana Delgado, R.; Abdelhafiz, M.; Plischke, E.: *Geochemische Simulation der Radionuklidrückhaltung in kristallinen Gesteinen unter Berücksichtigung von Heterogenitäten*, Jahrestagung der Fachgruppe Nuklearchemie 2024 (GDCh), 05.-07.11.2024, Karlsruhe, Germany.
- Borgonovo, E., Figalli, A., Plischke, E., Savaré, G.: Global Sensitivity Analysis via Optimal Transport, *Management Science*, Online First, 2024
- Borgonovo, E., Plischke, E., Rabitti, G.: The many Shapley values for explainable artificial intelligence: A sensitivity analysis perspective, *European J. Operational Research* 318(3): 911-926, 2024
- Abdelhafiz, M., Plischke, E., Röhlig, K.-J.: Global Sensitivity Analysis: Understanding Radioactive Transport Models for Crystalline Host Rocks, GeoSaxonia 2024, 23.-26.09.2024, Dresden, Germany

Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer: Technische Universität Clausthal, Institute of Geotechnology and Mineral Resources,		Förderkennzeichen: 02 E 12112B
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Systematic sensitivity analysis for mechanistic geochemical models using field data from crystalline rock (SANGUR), Teilprojekt B		
Zuordnung zum FuE-Programm: C3.1 Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-)Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung C3.3 Werkzeuge der Sicherheitsanalysen		
Laufzeit des Vorhabens: 01.02.2023 bis 31.01.2026	Berichtszeitraum: 01.07.2024 bis 31.12.2024	
Gesamtkosten des Vorhabens: 249.921,00 EUR	Projektleiter: Dr.-Ing Mostafa Abdelhafiz	

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

- AP1: State-of-the-Art Bericht zur Sensitivitätsanalyse
- AP2: Ableitung des reaktiven Transportmodells (ohne direkte Beteiligung TUC)
- AP3: Modellparametrisierung und Unsicherheiten (ohne direkte Beteiligung TUC)
- AP4: Prototyping einer Toolbox
- AP5: Anwendung der Sensitivitätsanalyse auf einen Testfall
- AP6: Modellreduktion und zukünftige Prioritäten
- AP7: Projektleitung

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP4: Eine neuere Version der Toolbox ist verfügbar, die über eine verbesserte Benutzeroberfläche (GUI), erhöhte Robustheit und bessere Benutzeranleitungen verfügt.

Für die Versionsverwaltung und Dokumentation wird ein Git-Repository eingerichtet: <https://gitlab.gwdg.de/mostafa.abdelhafiz/sa-toolbox> .

AP5: Entwicklung eines neuen Probenahmeschemas auf Basis von sequentiellem Stick-Breaking, das die gleichmäßige Probenverteilung auf einem Simplex verbessert und die Summe-eins-Regel für die kompositionellen Anteile einhält.

AP7: Monatlich: Online-Meetings von HZDR und TUC.

Projektmeeting in ÚJV Řež (30.9. / 1.10.2024).

4. Geplante Weiterarbeiten

AP1: Die Literaturrecherchearbeit am State-of-the-Art wird fortgesetzt und spezifische Anforderungen werden in einem aktualisierten SOTA-Bericht (V2) dokumentiert.

AP4: Durchführung eines externen Testlaufs der neuen Toolbox-Version mit externen Benutzern, sowie Erstellung eines Benutzerhandbuchs zur Unterstützung der Anwender.

AP5: Anwendung der Sensitivitätsanalyse auf einen neuen Testfall, der mit aktuellen Felddaten durchgeführt wurde.

AP7: Weiterführung der monatlichen Online-Meetings zwischen HZDR und TUC. Projektmeetings am HZDR und der TU Clausthal

5. Berichte, Veröffentlichungen

- Abdelhafiz, M., Plischke, E., Röhlig, K.-J., Global Sensitivity Analysis: Understanding Radioactive Transport Models for Crystalline Host Rocks, Poster presented at GeoSaxonia 2024, 23-26 Sep 2024, Dresden.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 12122A
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Stabilität von Mineralphasen des Eisens im Nahfeld eines Endlagers (STAMINA), Teilprojekt A		
Zuordnung zum FuE-Programm: Forschungsgebiet Endlagerung, FuE-Feld C3.1: Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-) Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung		
Laufzeit des Vorhabens: 01.04.2023 bis 31.03.2026	Berichtszeitraum: 01.07.2024 bis 31.12.2024	
Gesamtkosten des Vorhabens: 571.790,00 EUR	Projektleiter: Dr. Sven Hagemann	

1. Vorhabenziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Das Vorhaben verfolgt das Ziel, ein chemisches und thermodynamisches Modell für die Chemie des Eisens im Nahfeld eines Endlagers zu entwickeln. Hierfür werden Ergebnisse aus früheren Vorhaben sowie aus der Literatur zusammengefasst und noch bestehende Erkenntnislücken zum zweiwertigen Eisen durch zusätzliche Experimente geschlossen. Wo erforderlich, soll die Berechnung von Aktivitätskoeffizienten von komplexen Eisenspezies ermöglicht werden. Gemeinsam mit dem Verbundpartner wird die finale Auswahl an thermodynamischen Daten (Pitzer-Koeffizienten, Komplexbildungskonstanten, Löslichkeitskonstanten) dokumentiert und publiziert. Parallel hierzu wird ein Dokument erstellt, das das bestehende Wissen zur Kinetik der Phasenbildung aufbereitet und Empfehlung zur Auswahl von Festphasen bei der Durchführung geochemischer Modellrechnungen gibt.

Die Arbeiten ermöglichen eine wesentlich verbesserte Modellierung der Eisen-Chemie in Systemen mit mittlerer bis hoher Ionenstärke, welche die Verwendung des thermodynamischen Pitzer Modells erfordern. Dieses gilt für die Anwendung in salinaren Lösungen im Kontext der Endlagerung im Wirtsgestein Steinsalz, aber explizit auch für Lösungen, die in norddeutschen Tonformationen auftreten können.

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

- AP1: Speziation
- AP2: Bestimmung der Löslichkeit relevanter Korrosionsphasen
- AP3: Erstellung eines Pitzer-Modells für zweiwertiges Eisen
- AP4: „Best-Practice“-Dokument zur geochemischen Modellierung von Eisenkorrosionsphasen in salinaren Lösungen (auf Englisch)
- AP5: Dokumentation der Datenselektion

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1: Für die Isopiestik und die UV/VIS-Messungen zur Aufklärung der Chlorokomplexbildung von Fe(II) in salinaren Lösungen wurde eine neue FeCl₂-Stammlösung hergestellt und charakterisiert. Aufgrund eines technischen Defekts der Glove-Box konnte eine geringfügige Oxidation der Stammlösung nicht ausgeschlossen werden, weshalb die Herstellung der FeCl₂-Stammlösung wiederholt werden musste. Eine weitere Planung für die Wasseraktivitäts-Linien bei sehr hohen Salzkonzentrationen für die Systeme Fe(II)-Na,K,Mg,Ca-Cl-H₂O(l) wurde erstellt. Eine weitere Linie im System Fe(II)-Mg-Cl-H₂O(l) wurde bereits bei 40°, 60° und 80°C ermittelt. Isopiestiche Töpfe für 3 weitere Wasseraktivitätslinien äquilibrieren zum Ende des Berichtszeitraum bei 40°C im Wasserbad. Untersuchungen haben gezeigt, dass die Auflösung der zur Oxidationsstabilität der Lösungen in die Tiegel zugegebenen Pd-Plättchens offensichtlich durch die Azidität der Stammlösung bei gleichzeitiger hoher Chlorid-Konzentration, höheren Temperaturen und langer Äquilibrierungszeit verursacht wird. Dem wird entgegengewirkt, zudem haben Pd-Analysen an den Lösungen in den Tiegeln gezeigt, dass die sich gebildete Pd-Konzentration die isopiesticen Untersuchungen meist nicht beeinträchtigt.

Tests mit der Durchflussküvette (0,1 mm Schichtdicke) bezüglich Handhabbarkeit, Oxidation der Lösungen und Wartezeit nach Temperaturänderung wurden abgeschlossen.

AP2: Die Analyse der Feststoffe aus der Versuchsreihe der (Mg,Fe^{II})-Hydroxycarbonat mit Hilfe von XRD ergab, dass außer bei den reinen Fe(II)- und Mg-haltigen Randsystemen von einem Nebeneinander von Chukanovit (FeII-Hydroxycarbonat) und Hydromagnesit (Mg-Hydroxycarbonat-Hydrat) ausgegangen werden muss. Ein geringumfänglicher Einbau von Fe^{II} oder Mg in die Phase des jeweils anderen Elements kann nicht ausgeschlossen werden. Bereiche mit nur jeweils einer homogenen festen Lösung auf Basis von Chukanovit oder Hydromagnesit liegen offenbar nicht vor. Es sind wie auch bei den Fe^{II}- bzw. Mg-Hydroxychloriden keine festen Lösungen notwendig, um die Versuchsergebnisse zu klären.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP1: Im nächsten Berichtszeitraum werden weitere Linien für die Systeme Fe(II)-Na,K,Mg,Ca-Cl-H₂O(l) bei sehr hohen Salzkonzentrationen bei 40, 60 und 80°C erstellt. Um die FeCl₂-Stammlösung noch besser zu charakterisieren, wird eine gravimetrische Bestimmungsmethode erarbeitet.

Nach Neubeschaffung einer Durchflussküvette wird mit den vorgesehenen UV/VIS-Messungen zur Aufklärung der Chlorokomplexbildung von Fe(II) in salinaren Lösungen begonnen.

AP2: Ergänzende Versuche zur Löslichkeit von Fe(OH)₂ in NaOH-Lösungen. Erneute XRD-Analyse der Chukanovit-Proben zur Bestimmung der entstandenen Festphasen.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Auftragnehmer: Karlsruher Institut für Technologie (Großforschungsaufgabe)		Förderkennzeichen: 02 E 12122B
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Stabilität von Mineralphasen des Eisens im Nahfeld eines Endlagers (STAMINA), Teilprojekt B		
Zuordnung zum FuE-Programm: C3.1 „Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-)Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung“		
Laufzeit des Vorhabens: 01.04.2023 bis 31.03.2026	Berichtszeitraum: 01.07.2024 bis 31.12.2024	
Gesamtkosten des Vorhabens: 239.471,61 EUR	Projektleiter: Dr. Marcus Altmaier	

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

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

AP 1: Speziation.

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

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

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

AP 5: Dokumentation der Datenselektion.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP 1: (i) Auswertung der EXAFS Untersuchungen im $\text{Fe}^{3+}\text{-Ca}^{2+}\text{-H}^+\text{-OH}^-\text{-Cl}^-\text{-H}_2\text{O(l)}$ System; (ii) Auswertung der EXAFS Untersuchungen im $\text{Fe}^{2+}\text{-Ca}^{2+}/\text{K}^+\text{-Cl}^-$ System (für Projektpartner GRS); (iii) Bewertung und Initiation (Festphasensynthese) von Experimenten im Fe(II)-CO_3 System.

AP 2: (i) Abschluss der Löslichkeitsexperimente mit $\text{Fe(OH)}_2(\text{cr})$ in KOH Lösung; (ii) Abschluss der Löslichkeitsexperimente mit $\text{Fe}_2(\text{OH})_3\text{Cl}$; (iii) Erweiterung und Weiterführung der Löslichkeitsexperimente im $\text{Fe}^{3+}\text{-Ca}^{2+}\text{-H}^+\text{-OH}^-\text{-Cl}^-\text{-H}_2\text{O(l)}$ System; (iv) Beginn der Löslichkeitsexperimente mit Fe(III) aus der Untersättigung in Abwesenheit (+ Anwesenheit) von Carbonat.

AP 3: (i) Erweiterung des thermodynamischen SIT-Modells für das Fe(II) System auf Grundlage der experimentellen Daten aus den Löslichkeitsexperimenten mit $\text{Fe}_2(\text{OH})_3\text{Cl}$; (ii) Erstellung eines thermodyn. Modells für das Fe(II) System bei hyperalkalischen pH-Werten auf Basis der experimentellen Daten mit $\text{Fe(OH)}_2(\text{cr})$ in KOH Lösung (in Koop. mit GRS); (iii) Finalisierung des Manuskripts zur Löslichkeit und Thermodynamik von $\text{Fe(OH)}_2(\text{cr})$ und $\text{Fe}_2(\text{OH})_3\text{Cl}$.

AP 4: Keine Aktivitäten.

AP 5: Finalisierung des Manuskripts zur Löslichkeit und Thermodynamik von $\text{Fe(OH)}_2(\text{cr})$ und $\text{Fe}_2(\text{OH})_3\text{Cl}$, als Beitrag zur Dokumentation der Datenselektion.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP 1: (i) Abschluss der Auswertung von EXAFS Untersuchungen im $\text{Fe}^{3+}\text{-Ca}^{2+}\text{-H}^+\text{-OH}^-\text{-Cl}^-\text{-H}_2\text{O(l)}$ System; (ii) Abschluss der Auswertung von EXAFS Untersuchungen in im $\text{Fe}^{2+}\text{-Ca}^{2+}/\text{K}^+\text{-Cl}^-$ System (für GRS); (iii) Weiterführung von Experimenten im Fe(II)-CO_3 System.

AP 2: (i) Weiterführung der Löslichkeitsexperimente im $\text{Fe}^{3+}\text{-Ca}^{2+}\text{-H}^+\text{-OH}^-\text{-Cl}^-\text{-H}_2\text{O(l)}$ System; (ii) Erweiterung der Löslichkeitsexperimente mit Fe(III) aus der Untersättigung in Abwesenheit und Anwesenheit von Carbonat; (iii) Synthese von Fe(II) - und Fe(III) -Silikatfestphasen.

AP 3: (i) Abschluss der Erstellung eines thermodyn. Modells für das Fe(II) System bei hyperalkalischen pH-Werten auf Basis der experimentellen Daten mit $\text{Fe(OH)}_2(\text{cr})$ in KOH Lösung (in Koop. mit GRS); (ii) Einreichung des Manuskripts zur Löslichkeit und Thermodynamik von $\text{Fe(OH)}_2(\text{cr})$ und $\text{Fe}_2(\text{OH})_3\text{Cl}$.

AP 4: Arbeit (in Koop. mit GRS) an der Erstellung des „Best-Practice“-Dokuments zur Modellierung von Fe-Korrosionsphasen in salinaren Lösungen.

AP 5: Einreichung des Manuskripts zur Löslichkeit und Thermodynamik von $\text{Fe(OH)}_2(\text{cr})$ und $\text{Fe}_2(\text{OH})_3\text{Cl}$, als Beitrag zur Dokumentation der Datenselektion.

5. Berichte, Veröffentlichungen

P. Fürst et al., Posterpräsentation (*Thermodynamic description of Fe(II) solubility and hydrolysis in dilute to concentrated KCl systems*), „Goldschmidt 2024“, 18.08.–23.08.2024, Chicago, USA.

Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer: BGE TECHNOLOGY GmbH		Förderkennzeichen: 02 E 12133A
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Weiterführung der Entwicklung von Ausbau von Grubenbauen für ein HAW-Endlager in Tongestein (AGEnT002), Teilprojekt A		
Zuordnung zum FuE-Programm: C2.1 - Sicherheits- und Endlagerkonzepte		
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2023 bis 31.08.2025		Berichtszeitraum: 01.07.2024 bis 31.12.2024
Gesamtkosten des Vorhabens: 386.567,93 EUR		Projektleiter: Philipp Herold

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Tongesteine als potenzielles Wirtsgestein für ein Endlager für hochradioaktive Abfälle zeichnen sich unter anderem durch eine geringe hydraulische Leitfähigkeit und eine Sorptionsfähigkeit aus. Dem gegenüber stehen vergleichsweise ungünstige geomechanische Eigenschaften, die sich in einer geringen bis mäßigen Festigkeit und einem potenziellen Kriechverhalten äußern. Hinzu kommen die Eigenschaftsänderungen in Abhängigkeit des Wassergehaltes. Damit ist der Einsatz eines Ausbaus in den Grubenbauen zur Gewährleistung der betrieblichen Sicherheit unvermeidbar. Die Entwicklung eines geeigneten Ausbaukonzeptes bewegt sich im Spannungsfeld zwischen Gewährleistung der betrieblichen Sicherheit während der Einlagerung, dem Nachweis der Langzeitsicherheit sowie der Gewährleistung der Rückholbarkeit und berührt unterschiedliche fachliche Themenbereiche wie etwa Fragen zum Langzeitverhalten/Korrosion oder der geomechanischen Stabilität. Aus dem Themenblock der geotechnisch-numerischen Modellierung und Nachweisführung werden für das Vorhaben drei Teilziele definiert. Es soll eine Weiterentwicklung des Ausbaukonzeptes für langlebige Strecken durch eine vertiefende Planung der Tübbingschale und deren Einzelelemente (u.a. Nachgiebigkeitselemente) erfolgen. Weiterhin sollen erstmalig für Streckenkreuze geeignete Ausbaukonzepte entwickelt und dimensioniert werden. Abschließend soll eine Gesamtsystembetrachtung der 3D-hydromechanisch gekoppelten Berechnungen über die Betriebsdauer und großräumige dreidimensionale Standsicherheitsbetrachtung eines Einlagerungsfeldes erfolgen.

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

- AP 1 – Vertiefende Planung der Tübbingschale
- AP 2 – Entwicklung und Dimensionierung der Streckenkreuze
- AP 3 – Gesamtsystembetrachtung und Systemanalyse
- AP 4 – Dokumentation und Visualisierung

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP2: Für die Errichtung des Streckenkreuzes wurden zwei unterschiedliche Auffahrungskonzepte erarbeitet. In beiden Konzepten beginnt die Errichtung aus der geschlossenen Tübbingröhre der Hauptstrecke heraus. Der Abzweig wird dann entweder aus einem kleinen Fenster der Tübbingschale heraus errichtet und geweitet oder aber durch eine großflächigere Entnahme der Tübbingschale umgesetzt. Der letztgenannte Ansatz wurde in einem geomechanischen Modell umgesetzt, um die technische Umsetzbarkeit des Ansatzes besser bewerten zu können. Für den genutzten mittleren Parametersatz zeigt das Modell auch über die große Spannweite des Streckenkreuzes nur geringe Verschiebungen. Schädigungen sind nur kontornah zu erwarten. Der Auffahrungsansatz scheint damit technisch umsetzbar. Als technisch nicht oder nur schwer umsetzbar wird allerdings die Entnahme von bis zu 50% der Tübbingschale bewertet. In Abstimmung mit der Vortriebstechnologie wäre hier ein lokaler Wechsel des Ausbausystems notwendig, um so die Errichtung des Streckenkreuzes zu erleichtern.

AP3: Für die Systemanalyse des Streckenkreuzes wurde das zeitabhängige Verhalten des Gebirges und des Ausbausystems analysiert. Das zeitabhängige rheologische Verhalten des Gebirges wurde in FLAC3D mit zwei unterschiedlichen Ansätzen abgebildet. Aus bekannten Literaturdaten zu Verformungen bzw. Verschiebungen an Grubenräumen im Tongestein wurde in Herold et al. (2019) ein Materialmodell auf Basis des Norton-Kriechgesetzes in Kombination mit dem Mohr/Coulomb-Gesetz inklusive einer Entfestigung abgeleitet. In diesem Ansatz setzt sich die Deformation bzw. das „Kriechen“ stetig fort. Aus bestehenden Anlagen und untertägigen Experimenten, ist bekannt, dass die Deformation bzw. das „Kriechen“ nach sehr langen Zeiträumen zum Erliegen kommt. Deshalb wurde ein zweiter Ansatz mit einem zeitlich abklingenden Kriechen in die Modelle einbezogen. Für beide Ansätze wurde ein Zeitraum von 100 Jahren simuliert.

Im Rahmen von 3D-Berechnungen wurde mit der Software ATENA ein Modell des Ausbausystems mit diskreter Modellierung der Bewehrungseinlagen im Beton auf Basis der Ergebnisse der Entwurfsplanung in AP2 aufgebaut. Über einen eigens etablierten Workflow werden die Eingangsgrößen aus dem geomechanischen Modell (in FLAC3D) an ATENA übergeben. Mit dem Modell in ATENA kann das Verhalten des Ausbaus unter den Einwirkungen des rheologischen Verhaltens des Tongesteins sowie dem Schwindens des Betons, der Stahlkorrosion, der Betonkorrosion analysiert werden. Diese Arbeiten werden über den Berichtszeitraum hinweg fortgesetzt.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP3: Die Analysen mit ATENA und unter Berücksichtigung von Korrosionseffekten am Ausbau werden fortgesetzt.

AP4: Tübbingschale und Streckenkreuz stellen Komponenten des Endlagers dar. Nach dem Baukastenprinzip werden diese Komponenten visualisiert und in einem Gesamtmodell des Endlagers zusammengefügt.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Philipp Herold (Editor), Sven Bock, Ajmal Gafoor, Andreas Hucke, Jürgen te Kook, Eric Simo, Axel Studeny, Benedikt Wöhr (2024) Design of Support Structures for Underground openings in a future HLW repository in claystone - Entwicklung von Ausbauprozessen von Grubenbau für ein HAW-Endlager im Tongestein, 53. Geomechanik-Kolloquium, 15.11.2024, Freiberg

Philipp Herold (Editor), Sven Bock, Ajmal Gafoor, Andreas Hucke, David Seidel, Eric Simo, Axel Studeny, Benedikt Wöhr (2024) Design of concrete based segmental liners for a potential German HLW/SF repository in claystone, 9th Clay Conference, 25. bis 28.11.2024, Hannover

Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer: DMT GmbH & Co. KG		Förderkennzeichen: 02 E 12133B	
Vorhabensbezeichnung: Weiterführung der Entwicklung von Ausbau von Grubenbauen für ein HAW-Endlager in Tongestein, Teilprojekt B			
Zuordnung zum FuE-Programm: C2.1 Sicherheits- und Endlagerkonzepte			
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2023 bis 31.08.2025		Berichtszeitraum: 01.07.2024 bis 31.12.2024	
Gesamtkosten des Vorhabens: 268.842,23 EUR		Projektleiter: Dr. Andreas Hucke	

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Tongesteine als potenzielles Wirtsgestein für ein Endlager für hochradioaktive Abfälle zeichnen sich unter anderem durch eine geringe hydraulische Leitfähigkeit und eine Sorptionsfähigkeit aus. Demgegenüber stehen vergleichsweise ungünstige geomechanische Eigenschaften, die sich in einer geringen bis mäßigen Festigkeit und einem potenziellen Kriechverhalten äußern. Hinzu kommen Eigenschaftsänderungen in Abhängigkeit des Wassergehaltes. Daraus resultiert, dass der Einsatz eines Ausbaus in den Grubenbauen zur Gewährleistung der betrieblichen Sicherheit unvermeidlich ist. Die Entwicklung eines geeigneten Ausbaukonzeptes bewegt sich im Spannungsfeld zwischen Gewährleistung der betrieblichen Sicherheit während der Einlagerung, dem Nachweis der Langzeitsicherheit sowie der Möglichkeit der Rückholung und berührt unterschiedliche fachliche Themenbereiche wie etwa Fragen zum Langzeitverhalten/Korrosion oder der geomechanischen Stabilität.

Der beschriebene Sachverhalt stellte für BGE TECHNOLOGY GmbH und DMT GmbH & Co. KG die Motivation dar, geeignete Ausbausysteme für ein Endlager für hochradioaktive Abfälle in Tongestein im Rahmen des FuE-Vorhabens AGEnT zu entwickeln. Aufbauend auf diesen Arbeiten sollen mit dem vorliegenden Vorhaben (AGEnT002) diese Entwicklung weitergeführt werden. Dies beinhaltet eine Weiterentwicklung des Ausbaukonzeptes für langlebige Strecken und ein Streckenkreuz zwischen denen sowie eine Gesamtsystembetrachtung eines Einlagerungsfeldes in Form hydromechanisch-gekoppelter Berechnungen über die Betriebsdauer und großräumige 3D-Standsicherheitsbetrachtung des Gesamtendlagers. Ziel des Vorhabens ist die Erarbeitung eines Gesamtkonzeptes für den Ausbau für verschiedene Arten von Grubenräumen in verformbarem Tongestein.

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

AP 1: Vertiefende Planung der Tübbingsschale nach EC2

AP 2: Entwicklung und Dimensionierung der Streckenkreuze

AP 3: Gesamtsystembetrachtung und Systemanalyse

AP 3.1: Gesamtsystembetrachtung

AP 3.2: Systemanalyse

AP 4: Dokumentation und Visualisierung

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Die für AP 1 begonnenen Arbeiten zur Modellierung des Tübbingausbaus wurden fortgesetzt. Die Vorgehensweise mit der Berechnung der Belastungen mittels eines FLAC3D-Modells und des Transfers auf ein 3DEC-Modell mit detaillierter Modellierung des Tübbingausbaus führten zu Beginn zu deutlichen Schwierigkeiten, da ungleichförmige Verformung zu einem Versagen des Tübbingausbaus in dem 3DEC-Modell führten. Durch Modellanpassungen sowohl im FLAC3D-Modell als auch im 3DEC-Modell konnten diese Schwierigkeiten verringert werden. Allerdings konnten sie während der Projektbearbeitung noch nicht endgültig behoben werden.

Deshalb wurde entschieden, ein Kalibrierungsmodell zu erstellen, welches sich an einem realen Praxisfall orientiert, um die o.g. Problematik zu beseitigen.

In dem Berichtszeitraum fand hierzu die Befahrung eines mit Tübbingausbau gesicherten Tunnels statt, welcher im Folgenden als Basis für die Modellkalibrierung herangezogen werden soll. Bei der Befahrung des Grubenwasserkanals Ibbenbüren konnte das Verhalten des Tübbingausbaus im eingebauten Zustand besichtigt werden. Hier zeigte sich, dass der Kanal, welcher in einer Teufe von max. 100 m liegt, Konvergenzen bis max. 6 mm auftreten.

Da dieser Kanal auch teilweise in Tongesteinen liegt, wurde beschlossen, die aktuellen Modelle in diese Teufe zu legen und die gekoppelte Vorgehensweise zu überprüfen. Ziel ist es, eine vergleichbare Größenordnung an Verformung sowie ein generell vergleichbares Verhalten der Tübbingsäule nachzubilden.

Parallel wurden die Tätigkeiten für AP 3 begonnen. Hier wurden 2 großräumige FLAC3D Modelle für beide mögliche Layouts (Leiter- und Fischgrätenlayout) mit definierten Pfeilerbreiten erstellt und für den mittleren Parametersatz berechnet. Im FLAC3D wurden dazu Macros geschrieben, die eine automatisierte Erstellung der Modelle und somit eine Variation der Pfeilerbreiten erlauben. Die Berechnungen mit den ersten abgestimmten Dimensionen (Pfeilerbreite = 3-mal Streckenbreite) ergaben stabile Pfeiler als Ergebnis von rein mechanischen Berechnungen. Ebenfalls haben die Variation von Gebirgsfestigkeit und Spannungszustand begonnen und erste Ergebnisse erzielt. Es zeigt sich, dass für geringerfestes Tongestein eine Erhöhung der Pfeilerbreite notwendig wird.

4. Geplante Weiterarbeiten

Für die Ausbaumodellierung der Hauptstrecken werden Kalibrierungsrechnungen auf Basis der Erfahrungen des Grubenwasserkanals Ibbenbüren durchgeführt, um die gewählte Vorgehensweise der Kopplung der FLAC3D-3DEC für die Nachbildung des Tübbingausbaus zu überprüfen und zu kalibrieren. Anschließend werden die Erkenntnisse dieser Kalibrierungsberechnungen auf das ursprüngliche Modell übertragen und die endgültige Dimensionierung des Tübbingausbaus vorgenommen.

Für beide modellierte Layouts (Leiter- und Fischgrätenlayout) werden die Berechnungen mit den 2 Parametersätzen und unterschiedlichen Spannungszuständen abgeschlossen und es wird überprüft, ob die gewählte Pfeilerbreite aus gebirgsmechanischer Sicht ausreichend ist. Wenn erforderlich (bei geringen Gebirgsfestigkeiten), werden die Pfeilerbreiten erhöht und die gebirgsmechanisch erforderliche Pfeilerbreite ermittelt. Anschließend wird eine thermische Einwirkung resultierend aus der Einlagerung aufgebracht und die Temperaturentwicklung im Gebirge wird analysiert. Auf Basis der Ergebnisse wird anschließend bewertet, ob die aus gebirgsmechanischer Sicht erforderlichen Pfeilerbreiten auch bei thermischer Belastung ausreichend sind.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Philipp Herold, Sven Bock, Ajmal Gafoor, Andreas Hucke, Jürgen te Kook, Eric Simo, Axel Studeny, Benedikt Wöhr (2024): Design of Support Structures for Underground openings in a future HLW repository in claystone. 53. Geomechanik-Kolloquium, Tagungsbeiträge. Heft 2024-3.

Philipp Herold, Ajmal Gafoor, Eric Simo, David Seidel, Andreas Hucke, Sven Bock, Benedikt Wöhr, Axel Studeny (2024): Design of concrete-based segmental liners for a potential German HLW/SF repository in claystone. 9th International Conference on Clays in Natural and Engineered Barriers for Radioactive Waste Confinement, Hannover, Germany

Zuwendungsempfänger: Technische Universität Bergakademie Freiberg, Akademiestr. 6, 09599 Freiberg	Förderkennzeichen: 02 E 12143
Vorhabensbezeichnung: Feinerkundung der Steinsalzkontur im Bereich zukünftiger Verschlussbauwerke in HAW-Endlagern durch in situ Raman-Spektroskopie (SaRa)	
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: C2.3 Geotechnische und technische Barrieren	
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2023 bis 30.06.2026	Berichtszeitraum: 01.07.2024 bis 31.12.2024
Gesamtkosten des Vorhabens: 517.971,00 EUR	Projektleiter: Dr. Daniela Freyer

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Ziel des Vorhabens ist die Schaffung der wissenschaftlichen und praktischen Voraussetzungen für die Feinerkundung der Steinsalzkontur im Bereich zukünftiger Verschlussbauwerke in HAW-Endlagern durch eine Kombination aus 3D Kartierung (oder Fotografie) mit ortsauflösender *in situ* Ramanspektroskopie. Dazu wird am Institut für Thermische Verfahrenstechnik, Umwelt- und Naturstoffverfahrenstechnik (ITUN) ein modular zusammengesetztes mobiles Raman-Spektrometer mit 3D Fotografie entwickelt. Dieses muss für eine im Salzgebirge untertage universelle Einsetzbarkeit eine Reihe von Bedingungen erfüllen: Robustheit; Laser geeigneter Wellenlänge für 2 verschiedene Bereiche und genügender Stärke (Minerale liefern Spektren geringerer Intensität als z. B. organische Materialien); schnelle Positionierbarkeit des Messkopfes am Stoß; Verarbeitbarkeit von Spektren mit überlagerter Fluoreszenz; Kombination von Spektrum und optischen Scan der zu vermessenden Fläche; optimierte Messzeiten (Sekunden bis Minuten) zum Erhalt auswertbarer und reproduzierbarer Spektren pro Messpunkt. Die Umsetzung dieser Anforderungen ist wesentlicher Inhalt des FuE-Vorhabens. Die Entwicklung des portablen Raman-Messsystems wird vom Institut für Anorganische Chemie (IfAC) mit Erfahrungen zur ramanspektroskopischen Charakterisierung von Salzmineralen gestützt und begleitet. Gemeinsam werden Testmessungen an Salzprobekörpern im Labor sowie unter *in situ* Bedingungen im ehemaligen Kalibergwerk der Grube Teutschenthal durchgeführt.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Zusammenstellung von Referenz-Ramanspektren der im Steinsalz relevanten Nebenbestandteile und Automatisierung der Differenzierung anhand ihrer Ramanspektren
- AP2: Aufbau, Inbetriebnahme und Automatisierung des Ramanmesssystems
- AP3: Mögliche Algorithmen zur Erhöhung der Selektivität
- AP4: Einfluss der Messparameter auf das Auflösungsvermögen und die Analysegeschwindigkeit unter *in situ* Bedingungen
- AP5: *In situ* Erprobung der mobilen Raman-Spektroskopie
- AP6: Dokumentation und Berichtserstellung

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1: Erste Messungen zur Erzeugung von Referenz-Ramanspektren mit dem am ITUN neu entwickelten Ramanmesssystem wurden an Salz-Proben (Bohrkernen) des IfAC durchgeführt.

AP2: Die LabView-Steuerung der beiden Laser (671nm und 785nm SERDS) sowie des Laser-Shutters wurde für die Integration in das automatische Messsystem optimiert. Ebenso erfolgt die Steuerung der 3D-Kamera (inklusive Kollisionskontrolle für den Roboterarm) sowie die Steuerung des Spektrometers über eine durch das ITUN programmierte LabView-Steuerung. Die Steuerung der einzelnen Komponenten wird dabei über einzelne subVIs (Unterprogramme) realisiert, die später vollautomatisiert zusammenarbeiten können.

AP3: Nach umfassenden experimentellen Untersuchungen an Anhydrit- und Gips-Proben wurde ein vollständiger Algorithmus zur Spektren-Vorbereitung entwickelt. Darüber werden fluoreszenz- und quasi-rausch-freie Spektren für die weitere automatisierte Auswertung erhalten. Für eine entsprechende Publikation in einer Fachzeitschrift wurde ein Manuskript erstellt.

AP4: Ziel der *in situ* Raman-Messungen ist eine kurze Messzeit bei einer gleichzeitigen Messgenauigkeit, die eine sichere Identifizierung der vorliegenden Minerale ermöglicht. Am Beispiel von Anhydrit und Gips-Proben wurden Untersuchungen dazu durchgeführt, inwiefern die Messzeit die Leistungsfähigkeit des entwickelten automatischen Auswertungsalgorithmus beeinflusst. Im Ergebnis zeigte sich, dass bei gleichzeitigem Vorliegen nur weniger Minerale bereits bei Messzeiten von nur ca. 100 ms auswertbare Spektren erhalten werden können.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP1: Die systematischen Messungen der am IfAC vorliegenden und dort bereits vermessenen Salz-Proben(Kerne) mit dem am ITUN neu entwickelten Ramanmesssystem werden weiter fortgesetzt.

AP2: Die LabView-Steuerung für den Roboterarm wird in Form eines subVI-Unterprogramms erstellt.

AP3: An weiteren Salzmineralen und unter verschiedenen Messbedingungen wird der entwickelte Spektren-Auswertalgorithmus getestet und bei Bedarf gezielt optimiert.

AP4: Der Einfluss der Messparameter auf das Auflösungsvermögen und die Analyse-geschwindigkeit wird an weiteren Salzmineralen und unter verschiedenen Randbedingungen (Störlichteinfluss etc.) tiefergehend untersucht.

AP5: Erste quasi-*in situ* Messungen mit dem automatisierten Raman-Messsystem an einem Probenregal mit Salzmineralprobekörpern sollen durchgeführt und ausgewertet werden.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Vortrag zur Vorstellung des Projektes einschließlich erreichtem Kenntnisstand zum 14th US/German Workshop on Salt Repository Research, Design, & Operations, 24.-27.06.2024 in Manchester: J. Sohr, D. Gokuladas, D. Freyer, A. Bräuer „In situ Raman spectroscopy of rock salt contours in planned drift sealing locations of HAW repositories (SaRa project)“.

Auftragnehmer: Friedrich-Schiller-Universität Jena (FSU)		Förderkennzeichen: 02 E 12153A
Vorhabensbezeichnung: Erosion von Bentonit unter In-situ Bedingungen durch Einwirkung natürlicher Wässer in geologischen Tiefenlagern. Kurztitel: EVIDENT		
Zuordnung zum FuE-Programm: C2.3 Geotechnische und technische Barrieren C3.1 Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-) Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung		
Laufzeit des Vorhabens: 01.06.2023 bis 30.05.2026	Berichtszeitraum: 01.07.2024 bis 31.12.2024	
Gesamtkosten des Vorhabens: 395.520,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Schäfer	

1. Vorhabenziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

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

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1: Experimentelle Arbeiten an den geplanten Erosionsexperimenten wurden fortgesetzt. Es wurden zwei MX-80-Bentonit-Proben mit Quarzbeimengungen (Korngröße: 50-64 µm) von 20 Prozent begonnen, um Vergleiche zu Experimenten aus dem Kolorado-e³-Projekt zu ziehen. Diese Erosionsexperimente werden mit Grimsel-Grundwasser mit einer Zugabe von 2 mM Ca durchgeführt. Zusätzlich zu den Vergleichserosionsexperimenten wurde der erste Erosionsexperimentversuch mit einem Bohrkern begonnen, der aus dem thermisch behandelten MX-80-18E-Block entnommen wurde. Als Kontaktwasser wurde reines Grimsel-Grundwasser verwendet. Das Aufmahlen der thermisch behandelten Bentonit-Proben wurde abgeschlossen. Die Homöionisierung und Größenfraktionierung in Fraktionen kleiner als 50 nm, 50–200 nm und 200–2000 nm mittels Zentrifugation aus den aufgemahlten Proben wurde fortgesetzt. Erste Ergebnisse der NTA zur Partikelkonzentration im Effluent der Erosionsexperimente zeigen eine erhöhte Erosionsrate des thermisch behandelten MX-80-18E-Bentonits im Vergleich zu den Erosionsraten, die bei reinem, unbehandeltem Bentonit im Kolorado-e³-Projekt festgestellt wurden. Es wurde Kontakt mit SKB aufgenommen, um unbehandelten MX-80-Bentonit aus der gleichen Charge wie der thermisch beeinflussten MX-80-18E zu erhalten, so dass ein chargenunabhängiger direkter Vergleich möglich sein wird.

AP3: Das Jahresmeeting fand am 9.–10.12.2024 in Köln im Hybridformat mit den Projektpartnern GRS, KIT-INE, FSU und PtKA, sowie Vertretern des Grimsel Felslabor Experiments CFM (Nagra, Fracture Systems und BGE) statt.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP1: Der Abschluss der Zentrifugation in Fraktionen der thermisch behandelten Proben und die Gewinnung von Pellets für die Durchführung von Erosionsexperimenten wird angestrebt. Die Analyse des Effluenten und die Auswertung der gestarteten Erosionsexperimente werden durchgeführt. Nach Erreichen eines Gleichgewichtszustands im Effluent werde die begonnenen Erosionsexperimente beendet und neue Erosionsexperimente mit den verbleibenden thermisch behandelten Bentonitproben gestartet. Weiter Messungen mit der spICP-MS (siehe auch AP 3) sollen durchgeführt werden, um einen Methodenvergleich zur Quantifizierung der Bentoniterosion zu entwickeln.

AP 3: Ein weiterer längerer Aufenthalt am KIT-INE ist geplant, um die LIBD-Messungen abzuschließen. Bilaterale Treffen mit Projektpartnern zur Koordinierung der Zusammenarbeit an Experimenten, Planung weiterer Experimente und der Modellierung sind vorgesehen.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Schafmeister, M.-T. and Schäfer, T. (2024) Hydrogeologische Aspekte bei der Endlagerung radioaktiver Abfälle. *Grundwasser* 29, 1-2.

Nagel, T., Rühaak, W., Amann, F., Bracke, G., Buske, S., Kowalski, J., Reiche, S., Schäfer, T., Scheytt, T., Stumpf, T., Völzke, H., Wellmann, F. and Kolditz, O. (2025) Deep geological disposal. *Environmental Earth Sciences* 84, 78.

Hupfer, S., Pingel, J., Lanyon, B., Schneeberger, R., Blechschmidt, I., Enzmann, F., Sadeghnejad, S. and Schäfer, T. (2025, to be submitted) Quantification of bentonite mass loss in shear zone from CT scans using digital rock physics and machine learning approach: example from the LIT experiment (GTS, Switzerland). *Appl. Clay Sci.*

Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer: Karlsruher Institut für Technologie (Großforschungsaufgabe)		Förderkennzeichen: 02 E 12153B
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Erosion von Bentonit unter In-situ Bedingungen durch Einwirkung natürlicher Wässer in geologischen Tiefenlagern (EVIDENT), Teilprojekt B		
Zuordnung zum FuE-Programm: C1.1 Geowissenschaftliche und geotechnische Methoden zur Standorterkundung (Feld und Labor), C1.2 Charakterisierung des Geosystems und Geosynthese, C1.3 Thermisch, hydraulische, chemische und (mikro-)biologische (THMcb) Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung, C2.3 Geotechnische und technische Barrieren und C3.3 Werkzeuge der Sicherheitsanalyse		
Laufzeit des Vorhabens: 01.06.2023 bis 30.05.2026	Berichtszeitraum: 01.07.2024 bis 31.12.2024	
Gesamtkosten des Vorhabens: 388.297,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Geckeis	

1. Vorhabenziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

AP1: Experimentelle Arbeiten

AP2: Modellrechnungen

AP3: Projektkoordination und Qualitätsmanagement

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Zur Vorbereitung der zukünftigen *in situ* Radionuklid-Tracer-Tests in einem Bereich des Grimsel Felslabors, der von Lamprophyrintrusionen durchgezogen ist, wird die elementare und mineralogische Charakterisierung des Lamprophyrgesteins durchgeführt. Zudem wird erstmals die Sorption von Radionukliden an Lamprophyrgesteinsproben untersucht und mit der Sorption an Granodiorit verglichen. Zwei Bohrkernproben (als 17.3 und 17.5 bezeichnet) aus Granodiorit sowie Lamprophyr wurden vom Grimsel Felslabor erhalten, um Sorptionsversuche durchzuführen. Die Bohrkernproben wurden zunächst mittels μ CT gescannt. Die Ergebnisse zeigen, dass der Lamprophyr eine schichtartige Struktur aufweist, während der Granodiorit eine isotrope Mineralverteilung zeigt. Repräsentative Probenschnitte ($10 \times 10 \times 8$ mm) wurden aus den Bohrkernen für Sorptionsversuche an den Schnittoberflächen präpariert. Für Batch-Sorptionsversuche wurde Granodiorit und Lamprophyr gemahlen und durch Sieben Pulverproben mit Partikelgrößen $<63 \mu\text{m}$ hergestellt. Diese pulverisierten Proben werden derzeit umfassend mittels XRD, XRF, BET, SEM und ICP-OES/MS charakterisiert. Die SEM-Bildgebung zeigt Unterschiede in der Partikelmorphologie, die die spezifische Oberfläche und damit die Sorptionseigenschaften beeinflussen könnten. Die XRD-Analyse bestätigte, dass beide Gesteine einen hohen Quarzgehalt sowie unterschiedliche Anteile an Biotit, Muskovit und weiteren Mineralien aufweisen.

Für den *in-situ* Radionuklid-Tracer-Test CFM Run 22-02 wurde die Bestimmung von ^{242}Pu und ^{243}Am in den Proben aus dem Elutionstailing mittels AMS (Ion Beam Physics Gruppe der ETH, Zürich) fortgesetzt, um die Migration dieser Radionuklide noch bis zu 2500 Stunden nach Beginn des Experiments beobachten zu können. Nach diesem Zeitraum lagen die Konzentrationen von ^{242}Pu und ^{243}Am bei über 3 bzw. ca. 2.5 Größenordnungen niedriger als bei den Maxima der Durchbruchkurve. Dies deutet auf eine langzeitige und verzögerte Freisetzung von Spurenanteilen von Pu(IV) und Am(III) aus der Scherzone hin, wobei auch kolloidale Spezies eine Rolle spielen können, wie zuvor auch für Np(IV) beobachtet wurde.

4. Geplante Weiterarbeiten

Repräsentative Probenstücke aus den Bohrkernen werden durch SEM-EDX auf ihre mineralogische Zusammensetzung untersucht und mit zusätzlichen μ CT-Scans auf Oberflächenporen und -risse überprüft. Mit diesen Probenstücken werden Sorptionsversuche mit ^{232}U , ^{238}Pu , ^{241}Am , ^{237}Np und ^{99}Tc im Grimsel Grundwasser und in An/Abwesenheit von Bentonitkolloiden mittels Autoradiografie durchgeführt. Außerdem werden ausgewählte Reduktionsmittel (Rongalit und Hydrazin) und Puffersysteme (Natriumbicarbonat und TRIS) getestet, um die *in-situ* Redoxbedingungen in der GTS Scherzone zu simulieren.

Weitere Arbeiten zum Mock-up-Test sowie zum LIT Experiment, die schon im vorherigen Berichtsraum vorgesehen waren, werden nun durchgeführt.

Weitere Elutionsproben aus dem CFM Run 22-02 werden mittels ICP-MS auf die Radionuklide ^{233}U , ^{238}U und ^{232}Th analysiert.

5. Berichte, Veröffentlichungen

F. Quinto, I. Blechschmidt, H. Geckeis, B. Lanyon, C. Marquardt, U. Noseck, M. Plaschke, R. Schneeberger, T. Schäfer. Influence of Groundwater Residence Time on In-situ Migration of ^{233}U , ^{237}Np , ^{242}Pu and ^{243}Am at the Grimsel Test Site (Switzerland). Vortrag an der Konferenz "Plutonium Futures, the Science 2024", 8 – 12 September 2024, Charleston, SC, USA.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 12153C
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Erosion von Bentonit unter In-situ Bedingungen durch Einwirkung natürlicher Wässer in geologischen Tiefenlagern (EVIDENT), Teilprojekt C		
Zuordnung zum FuE-Programm: C2.3 Geotechnische und technische Barrieren C3.1 Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-) Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung		
Laufzeit des Vorhabens: 01.06.2023 bis 30.05.2026	Berichtszeitraum: 01.07.2024 bis 31.12.2024	
Gesamtkosten des Vorhabens: 291.110,00 EUR	Projektleiter: Dr. Holger Seher	

1. Vorhabenziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

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

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP2: Das Konzept des Benchmarks zum Kationenaustausch und Transport im Bentonit unter Hinzugabe einer Ca-haltigen Festphase (Bassanit) oder eines Ca-angereichertem Grundwassers wurde auf dem CFM-Treffen in Tokio vorgestellt. Dieses Konzept wurde weiter ausgearbeitet, mit den Partnern in EVIDENT diskutiert und erforderliche experimentelle Daten als In- und Output für die Simulationen des Benchmarks ausgetauscht.

Nach dem Vorliegen neuer experimenteller Ergebnisse folgt die Durchführung weiterer Modellrechnungen mit dem Code CLAYPOS zur Diffusion von Radionukliden im Bentonit im LIT sowie in den Mock-Up Experimenten. Überprüfung des Einflusses unterschiedlicher Transportpfad-Längen auf die beobachteten Profile von Tc-99, Np-237 und U-233, die sich aufgrund der Ringgeometrie und der Tatsache, dass eines der Glasprobengefäße bei der Bentonit-Aufsättigung im Mock-Up Test zerbrochen ist, ergeben.

Zwischen den Projektpartnern fand ein Austausch dazu statt, wie die Ansätze zur Berechnung der Kolloidstabilität aus der Dissertation von Holger Seher (DOI: 10.3390/colloids4020016) und dem Ansatz von SINFONIA (KIT, FSU, DOI: 10.1016/j.cis.2021.102469) aus 2021 zusammengebracht werden können, um in einem gemeinsamen Code zur Verfügung zu stehen.

AP3: Teilnahme am CFM-Phase 5 Treffen in Tokio, Japan am 01. und 02. Juli 2024 und EVIDENT Projekttreffen bei der GRS in Köln am 9. und 10. Dezember 2024.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP2: Die Arbeitsdokumente für den Benchmark zum Kationenaustausch im Bentonit werden finalisiert und durch den CFM-Projekt Koordinator an die Projektpartner verteilt. Es wird ein Zeitplan erstellt und der Start des Benchmarks initiiert.

Weiterführung der Simulationsrechnungen zur Radionukliddiffusion im LIT und Mock-up Experiment auf Basis aller vorliegenden Informationen.

Beginn für erste Rechnungen zur Vorhersage der Ergebnisse in den neu geplanten Feldexperimenten.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine

Auftragnehmer: Karlsruher Institut für Technologie (Universitätsaufgabe) Kompetenzzentrum für Materialfeuchte, 76128 Karlsruhe		Förderkennzeichen: 02 E 12163A
Vorhabenbezeichnung: Verbundprojekt: Vertikales hydraulisches Dichtsystem nach dem Sandwich-Prinzip – Hauptprojekt Phase 2 (Sandwich-HP2), Teilprojekt A		
Zuordnung zum FuE-Programm: C2.3 Geotechnische und technische Barrieren C3.1 Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-) Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung		
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2023 bis 30.06.2027	Berichtszeitraum: 01.07.2024 bis 31.12.2024	
Gesamtkosten des Vorhabens: 870.108,53 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Katja Emmerich	

1. Vorhabenziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Im Sandwich-Hauptprojekt Phase 2 (Sandwich-HP2) wird ein großmaßstäbliches in-situ Experiment zu einem vertikalen hydraulischen Verschlussystem nach dem Sandwich-Prinzip im Felslabor Mont Terri (CH) weitergeführt (Folgevorhaben von 02E11799A-C), das durch Laborexperimente unterschiedlichen Maßstabs und durch Modellsimulation unterstützt wird. Das Projekt wird gemeinschaftlich von KIT-IMB/MPA/CMM, GRS und TUBAF durchgeführt. BGR, Swisstopo, ENSI, Enresa, NWMO und NWS nehmen mit Eigenmitteln als assoziierte Partner teil.

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

AP1 (GRS, KIT): Weiterführung des In-situ-Experiments

Die kontrollierte Aufsättigung der Verschlussysteme in den beiden experimentellen Schächten wird fortgesetzt und durch Messungen im Verschlussystem sowie dem umgebenden Gebirge überwacht.

AP2 (KIT, TUBAF): Begleitendes Laborprogramm

Es werden weitere halbtechnische Versuche sowie MinSandwich- und Quelldruck-Experimente durchgeführt, die zur Modellkalibrierung und -validierung dienen.

AP3 (GRS, KIT, TUBAF): Interpretative Modellierung

Für den In-Situ-Versuch sowie ausgewählte Laborexperimente werden hydraulisch-mechanisch gekoppelte Modellrechnungen durchgeführt und dabei insbesondere neuere Double-Structure-Materialmodelle kalibriert. Zudem werden komplette Schachtverschlussysteme modelliert.

AP4 (KIT, GRS): Projektkoordination und Dokumentation

Die Koordination des Verbundprojektes liegt bei KIT. Die GRS koordiniert das in-situ Experiment in Zusammenarbeit mit Swisstopo und den beteiligten Mont Terri Partnern.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1: Siehe Projektstatusbericht der GRS zu 02E12163B.

AP2: In Zusammenarbeit mit dem Sandwich SP1 Projekt wurde die Baseline Study zu den mineralogischen und geotechnischen Grundparametern für Calcigel und Secursol UHP abgeschlossen.

Die MiniSandwichversuche 15 und 16 wurden gestartet (Calcigel W1/W2 mit Pearson Wasser A3). Im Test15 wurde schon zu Beginn ein höherer Quelldruck gegenüber Test16 beobachtet. Dabei war die Permeabilität des eindringenden Fluids mehrere Größenordnungen höher.

Der Fluiddruck im HTV-9 wurde im Juli planmäßig auf 20 bar (2 MPa) erhöht. Dies führte u.a. zu einem deutlichen Anstieg des Porendrucks in ES2. Ende August betrug dieser bereits 16 bar. Der Volumenstrom erhöhte sich kurzzeitig leicht und sank im weiteren Verlauf bis auf 1 ml/h. Im Oktober wurde zusätzlich das ES3 von oben aufgesättigt. Bereits mit einem Druck von 1 bar wurden ca. 70% des Porenraums im ES3 gefüllt. Die Axialspannung an der Oberseite von DS4 stieg auf über 30 bar (3 MPa). Der Volumenstrom sank bis Ende November auf 1 ml/h. Der Fluiddruck wurde stufenweise bis Anfang Januar auf 10 bar erhöht. Der HTV-9 ist vollständig gesättigt. Geringfügige Temperaturschwankungen in der Versuchshalle sind nun als deutliche Druckänderungen im unteren Schotter sowie in allen DS sowie in ES1 und ES2 zu beobachten.

Im Rahmen des Promotionsvorhabens zu den ES Materialien wurde mit dem Literaturstudium zur Kristallstruktur und Morphologie von Karbonatmineralen sowie deren Benetzungsverhalten begonnen.

AP3: siehe Halbjahresbericht von GRS und TUBAF zu 02E12163B bzw. 02E12163C.

AP4: Ein Projektmeeting fand am 23./24.10.24 online statt. Die Zusammenarbeit mit dem Sandwich-Task im DECOVALEX-2027 als Beobachter und Berater für Materialfragen sowie mit dem WP10 ANCHORS im EURAD-2 wurde gestartet. Es wird Calcigel Bentonite Granular Material, welches auch in Schacht 1 eingebaut wurde für ANCHORS zur Verfügung gestellt.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP1: Weiterführung von Aufsättigung und Monitoring der Verschlussysteme in den beiden Experimentalschächten.

AP2: Rückbau HTV-9, Vorbereitung HTV-10 sowie Durchführung Quelldruckversuche (Benchmarkversuche mit Calcigel und Charakterisierung Secursol MHP1 (70/30)) und MiniSandwich Versuche (u.a. mit Secursol MHP1 (70/30))

AP3: Siehe Halbjahresbericht von GRS und TUBAF zu 02E12163B bzw. 02E12163C.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Emmerich, K., Engineered barriers, the sandwich sealing system and the swelling of bentonites, George Brown Lecture 2024 of the Clay Minerals Group of the Mineralogical Society of the UK and Ireland at the 12th Mid European Clay Conference, Pilzen (9/24).

Im Rahmen des Projektes wurden 10 Beiträge (1 Vortrag und 9 Poster) während der Clay Conference 2024 in Hannover (11/24) präsentiert. Federführend war KIT u.a. für folgende Beiträge:

Emmerich, K. et al., A vertical Sandwich shaft sealing system at the Mont Terri rock laboratory; Rölke, C. et al., MiniSandwich experiment – performance test in laboratory of a bentonite-based shaft sealing system; Bakker, E. et al., Exchangeable and soluble ion populations in semi-technical scale Sandwich sealing system experiments

Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 12163B
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Vertikales hydraulisches Dichtsystem nach dem Sandwich-Prinzip – Hauptprojekt Phase 2 (Sandwich-HP2), Teilprojekt B		
Zuordnung zum FuE-Programm: C2.3: Geotechnische und technische Barrieren, C2.4: Monitoring, C3.1: Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-) Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung		
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2023 bis 30.06.2027	Berichtszeitraum: 01.07.2024 bis 31.12.2024	
Gesamtkosten des Vorhabens: 1.258.340,00 EUR	Projektleiter: Dr.-Ing. Matthias Hinze	

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Im Sandwich-Hauptprojekt Phase 2 (Sandwich-HP2) wird ein großmaßstäbliches in-situ Experiment zu einem vertikalen hydraulischen Verschlussystem nach dem Sandwich-Prinzip im Felslabor Mont Terri (CH) weitergeführt (Folgevorhaben von 02E11799A-C), das durch Laborexperimente unterschiedlichen Maßstabs und durch Modellsimulation unterstützt wird. Das Projekt wird gemeinschaftlich von KIT-IMB/MPA/CMM, GRS und TUBAF durchgeführt. BGR, Swisstopo, ENSI, Enresa, NWMO und NWS nehmen mit Eigenmitteln als assoziierte Partner teil.

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

AP1 (GRS, KIT): Weiterführung des In-situ-Experiments

Die kontrollierte Aufsättigung der Verschlussysteme in den beiden experimentellen Schächten wird fortgesetzt und durch Messungen im Verschlussystem sowie dem umgebenden Gebirge überwacht.

AP2 (KIT, TUBAF): Begleitendes Laborprogramm

Es werden weitere halbtechnische Versuche sowie MinSandwich- und Quelldruck-Experimente durchgeführt, die zur Modellkalibrierung und -validierung dienen.

AP3 (GRS, KIT, TUBAF): Interpretative Modellierung

Für den In-Situ-Versuch sowie ausgewählte Laborexperimente werden hydraulisch-mechanisch gekoppelte Modellrechnungen durchgeführt und dabei insbesondere neuere Double-Structure-Materialmodelle kalibriert. Zudem werden komplette Schachtverschluss-systeme modelliert.

AP4 (KIT, GRS): Projektkoordination und Dokumentation

Die Koordination des Verbundprojektes liegt bei KIT. Die GRS koordiniert das in-situ Experiment in Zusammenarbeit mit Swisstopo und den beteiligten Mont Terri Partnern.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1: Die Aufsättigung der Dichtsysteme in beiden Schächten wurde fortgesetzt. Der Injektionsdruck in Schacht 1 wurde im Berichtszeitraum nahezu konstant bei ca. 20 bar absolut gehalten, die Injektionsrate liegt derzeit zwischen 13 und 14 ml/h. Die Sensordaten lassen auf eine vollständige Aufsättigung von DS1 und nahezu auch von DS2 schließen. Die radialen Spannungen in DS1 liegen zwischen 2,1 MPa und 2,75 MPa; in DS2 zwischen 1,1 MPa und 1,3 MPa. Im Juli führte eine erneute Verstopfung im Bewässerungssystem zu Schwierigkeiten bei der Druckbeaufschlagung. Das Problem wurde innerhalb weniger Tage behoben. In Schacht 2 wurde der Lösungsdruck zeitweise auf etwa 13 bar absolut erhöht und inzwischen wieder auf einen konstanten Wert von etwa 11 bar abgesenkt. Die Injektionsrate liegt derzeit bei etwa 8 ml/h. Die Sensordaten zeigen die fortschreitende Aufsättigung und einen Quelldruckaufbau (radiale Spannung derzeit 2,4 MPa) des unteren Dichtsegments sowie eine langsamere Aufsättigung der überliegenden Dichtsegmente. Ende Juni führte die Leckage eines Porendrucksensors in ES1 zu einem defekten Sensor-Interface, sodass zwischenzeitlich die Daten von insgesamt 12 angeschlossenen Sensoren nicht erfasst werden konnten. Das defekte Interface wurde nach der Sommerpause des Labors ausgetauscht und die Sensoren wieder mit der Datenerfassung verbunden. Um ein solches Problem in Zukunft zu vermeiden, wurden im November für die restlichen Porendrucksensoren Kabelboxen installiert, die ggf. ein Auffangen von Leckagen ermöglichen und die Elektronik der Datenerfassung vor Lösungszutritt schützen. Des Weiteren traten im August erneut Probleme bei der Datenerfassung der Feuchtesensoren auf. Die Verbindung wurde im November neu konfiguriert, um langfristig eine robuste Signalerfassung der Feuchtesensoren zu ermöglichen.

AP2: Siehe Halbjahresbericht von KIT und TUBAF zu 02E12163A bzw. 02E12163C.

AP3: Die Arbeiten an den Benchmarktests für Doppelstrukturmodelle wurden fortgesetzt und vergleichende Simulationen von TUBAF, GRS, IfG und ENSI durchgeführt. Siehe Halbjahresbericht von TUBAF zu 02E12163C. Des Weiteren wurde die bestehende HM-Simulation von Schacht 1 aktualisiert und Verbesserungspotentiale für die Simulation identifiziert. Für den Sandwich-Task innerhalb des Projektes DECOVALEX-2027 wurden zwei Interim-Meetings (September und Dezember, online) durchgeführt und eine Synthese der bisherigen Ergebnisse beim 2. Workshop (Oktober) beim BASE in Berlin präsentiert. Der Task wurde kontinuierlich weiterentwickelt und die Ergebnisse der Teams zusammengeführt.

AP4: Ein Projektmeeting fand am 23./24.10.24 online statt. Das Sandwich-Projekt wurde mit mehreren Beiträgen bei der Clay Conference (November) in Hannover vorgestellt. Ein neuer Sensordatenbericht für das SW-A Experiment liegt als Mont Terri Technical Note vor.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP1: Weiterführung von Aufsättigung und Monitoring der Verschlussysteme in den beiden Experimentalschächten.

AP2: Siehe Halbjahresbericht von KIT und TUBAF zu 02E12163A bzw. 02E12163C.

AP3: Fortsetzung der Modellkalibrierung und der hydraulisch-mechanischen Simulationen mit dem verbesserten Doppelstruktur-Materialmodell sowie durch Ergebnisse aus dem Sandwich-Task des Projektes DECOVALEX-2027.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Hinze, M. et al.: Sandwich-HP2: Vertical Hydraulic Sandwich Sealing System – Sensor Data Report 2023 / 2024, Mont Terri Technical Note TN2024-78, Dezember 2024.

Im Rahmen des Projektes wurden 10 Beiträge während der Clay Conference 2024 in Hannover (11/24) präsentiert. Federführend war die GRS u.a. für den folgenden Beitrag:

Friedenberg, L., Hinze, M. & Wiczorek, K.: Multi-scale modelling of the Sandwich experiment in Mont Terri, Clay Conference 2024, Hannover, 25.-28.11.2024.

Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer: Institut für Geotechnik, TU Bergakademie Freiberg, Gustav-Zeuner-Str. 1, 09599 Freiberg		Förderkennzeichen: 02 E 12163C
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Vertikales hydraulisches Dichtsistem nach dem Sandwich-Prinzip – Hauptprojekt Phase 2 (Sandwich-HP2), Teilprojekt C		
Zuordnung zum FuE-Programm: C2.3: Geotechnische und technische Barrieren, C2.4: Monitoring, C3.1: Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-) Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung		
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2023 bis 30.06.2027	Berichtszeitraum: 01.07.2024 bis 31.12.2024	
Gesamtkosten des Vorhabens: 456.512,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Thomas Nagel	

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Im Sandwich-Hauptprojekt Phase 2 (Sandwich-HP2) wird ein großmaßstäbliches in-situ Experiment zu einem vertikalen hydraulischen Verschlussystem nach dem Sandwich-Prinzip im Felslabor Mont Terri (CH) weitergeführt (Folgevorhaben von 02E11799A-C), das durch Laborexperimente unterschiedlichen Maßstabs und durch Modellsimulation unterstützt wird. Das Projekt wird gemeinschaftlich von KIT-IMB/MPA/CMM, GRS und TUBAF durchgeführt. BGR, Swisstopo, ENSI, Enresa, NWMO und NWS nehmen mit Eigenmitteln als assoziierte Partner teil.

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

AP1 (GRS, KIT): Weiterführung des In-situ-Experiments

Die kontrollierte Aufsättigung der Verschlussysteme in den beiden experimentellen Schächten wird fortgesetzt und durch Messungen im Verschlussystem sowie dem umgebenden Gebirge überwacht.

AP2 (KIT, TUBAF): Begleitendes Laborprogramm

Es werden weitere halbtechnische Versuche sowie MinSandwich- und Quelldruck-Experimente durchgeführt, die zur Modellkalibrierung und -validierung dienen.

AP3 (GRS, KIT, TUBAF): Interpretative Modellierung

Für den In-Situ-Versuch sowie ausgewählte Laborexperimente werden hydraulisch-mechanisch gekoppelte Modellrechnungen durchgeführt und dabei insbesondere neuere Double-Structure-Materialmodelle kalibriert. Zudem werden komplette Schachtverschluss-systeme modelliert.

AP4 (KIT, GRS): Projektkoordination und Dokumentation

Die Koordination des Verbundprojektes liegt bei KIT. Die GRS koordiniert das in-situ Experiment in Zusammenarbeit mit Swisstopo und den beteiligten Mont Terri Partnern.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1: Siehe Halbjahresbericht von KIT und GRS, 02E12163A bzw. 02E12163B

AP2: Am HTV-9 wurde am 03.07.2024 nach 510 Tagen Versuchslaufzeit der unten an das Sandwich-Sealing-System anliegende Fluiddruck planmäßig von 1,5 MPa auf 2,0 MPa erhöht. Der Calcigel in DS3 begann anschließend stärker zu quellen, was zum weiteren Verschließen von fluidzugänglichem Porenraum führte. Der sich bereits langsam aufbauende Porendruck in ES2 begann stärker anzusteigen. Der Fluiddruck von 2,0 MPa wurde bis zum Ende 2024 konstant gehalten. Um die beiden oberen Dichtsegmente aus Calcigel weiter zu testen, wurde am 10.10.2024 der Porenraum der ES3 über eine installierte Rohrleitung separat mit Pearson Water Typ A.3 geflutet und elf Tage später druckbeaufschlagt. Seit dem 25.10.2024 wird der Fluiddruck am ES3 bei 0,5 MPa konstant gehalten. Der Calcigel reagierte unverzüglich mit Quelldruckentwicklung, ersichtlich am Ansteigen der axialen Spannung zwischen dem DS4 und dem oberen Widerlager. Die unteren beiden vollständig gesättigten Dichtsegmente (DS1 und DS2 mit Secursol MHP1) zeigten sich dagegen unbeeinflusst von der Flutung der ES3. Als Nebeneffekt der nunmehr erreichten Vollsättigung zeigt sich eine stärkere Temperaturabhängigkeit der Porenwasserdrücke im System, konsistent mit Abschätzungen aus Fluidexpansivität und -kompressibilität.

AP3: In Abstimmung mit GRS wurden numerische Benchmarktests für Doppelstrukturmodelle konzipiert. Hierbei sollte insbesondere die Richtungsabhängigkeit der Massetransfervorgänge betrachtet und Unterschiede der Implementierungen in OpenGeo-Sys, COMSOL und CODE_BRIGHT untersucht werden. Zu Vergleichszwecken für aufwändige DSM Ansätze erfolgte die Kalibrierung eines einfachen Bentonitmodells, das sich auf die Abbildung des Quelldruckaufbaus fokussiert. Besondere Berücksichtigung fanden die in den Messdaten beobachteten Schwankungen, für die Konfidenz- und Vorhersagebänder quantifiziert wurden. Diese erlauben eine Abschätzung der erwartbaren Prognosegüten basierend auf vorhandenen Datensätzen. Da als eine mögliche Ursache der Schwankungen in den Messdaten die Verwendung unterschiedlicher experimenteller Aufbauten diskutiert wurde, wurden dazu gesonderte Berechnungen durchgeführt. In diesen wurde der Effekt von starker Wandreibung im Ödometer auf die radialen und axialen Spannungen an Probenunter- und oberseite für verschiedene Probengeometrien untersucht.

AP4: Die Zusammenarbeit mit der Modellierung im Sandwich-Task in DECOVALEX-2027 wurde fortgeführt. Es wurden Abstimmungen mit dem EURAD-2 Projekt ANCHORS mit dem Ziel einer erweiterten Analyse der HTV Versuche initiiert.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP1: Siehe Halbjahresbericht von KIT und GRS, 02E12163A bzw. 02E12163B

AP2: Es erfolgen der Ausbau und die Analyse von HTV-9. Erweiterung der messtechnischen Ausstattung um Verschiebungssensoren und Vorbereitung von HTV-10.

AP3: Fortsetzung der Modellkalibrierung und der hydraulisch-mechanischen Simulationen mit dem verbesserten Doppelstruktur-Materialmodell.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Im Rahmen des Projektes wurden 10 Beiträge während der Clay Conference 2024 in Hannover (11/24) präsentiert. Federführend war die TUBAF u.a. für folgende Beiträge:

C.B. Silbermann, M. Hinze, L. Friedenberg, P. Schädle, M. Knauth, T. Nagel. Benchmarking of Double-Structure Models for the Numerical Simulation of Swelling Clays. In 9th Clay Conference. 25–28 Nov, 2024, Hannover, Germany.

S. Kaiser, A.A. Chaudhry, M. Hofmann, T. Nagel. Modelling of mock-up tests for bentonite seals. In 9th Clay Conference. 25–28 Nov, 2024, Hannover, Germany.

Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer: Technische Universität Bergakademie Freiberg, Akademiestr. 6, 09599 Freiberg		Förderkennzeichen: 02 E 12173
Vorhabensbezeichnung: Entwicklung eines salzgrusbasierten Versatzkonzeptes unter der Option Rückholbarkeit – Phase 2 (SAVER)		
Zuordnung zum FuE-Programm: C2.3 Geotechnische und technische Barrieren		
Laufzeit des Vorhabens: 01.11.2023 bis 31.10.2025	Berichtszeitraum: 01.07.2024 bis 31.12.2024	
Gesamtkosten des Vorhabens: 473.567,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr.-Ing. Helmut Mischo	

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Im SAVER-Projekt (Phase 1) wurde die Anwendbarkeit des im GESAV-Projekt genutzten Versatzverfahrens auf das patentierte GESAV-Material als auch auf KOMPASS (Salzgrus)-Material weiter untersucht und die Parameter durch entsprechende Messeinrichtungen aufgenommen. Die Realitätsnähe der Versuche wurde weiter gesteigert durch den Einbau von POLLUX-Modellkörpern mit angenäherter Realgröße. Es konnte erfolgreich nachgewiesen werden, dass die Einbaumethode auf beide Materialien anwendbar ist. Durch regelmäßige geochemische Analysen wurden wichtige Erkenntnisse über die internen Prozesse bezüglich der Polyhalitbildung gewonnen.

Während des Einbaus wurden In-Situ-Proben entnommen, welche einen Teil der Datenbasis für das SAVER-II-Projekt bilden. Die Proben werden im Programm hinsichtlich Permeabilität, Dichte, Polyhalitgehalt, Korngefüge, Druckfestigkeit und weiteren Eigenschaften (das komplette Laborprogramm kann der Vorhabensbeschreibung entnommen werden) durch verschiedene Projektpartner untersucht. Ein weiterer wichtiger Teil des Projektes ist der Weiterbetrieb der untertägigen Großversuchsstände und die damit einhergehende Datenanalyse. Die gewonnenen Daten sollen den Projektpartnern sowie Interessenten aus der Forschungscommunity über eine Datenbank zugänglich gemacht werden.

Die Kooperation mit dem vom PTKA geförderten KOMPASS-Projekt (in Zukunft „MEASURES“) soll aktiv weitergeführt werden, da hier bereits sehr produktiv über die Laufzeit von SAVER I zusammengearbeitet wurde.

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

AP1 Untertägiges Messprogramm

- AP1.1 Fortsetzung des kontinuierlichen Monitorings der untertägigen Versatzkörper hinsichtlich Setzung, Druck, Feuchtigkeit, elektr. Leitfähigkeit, Permeabilität, Bewetterung
- AP1.2 Regelmäßige Auslesung, Auswertung und Analyse der untertägig generierten Datensätze

AP2 Laborprogramm

- AP2.1 Auswertung der in SAVER I entnommenen Proben beim Einbau, um Aussagen über das In-Situ-Verhalten beim Einbau von GESAV-, KOMPASS -und qualifiziertem trockenem Salzgrusmaterial mit Fuller-Verteilung treffen zu können
- AP2.2 Regelmäßige In-Situ-Probenentnahme aus den Versatzkörpern für mechanische und geochemische Laboruntersuchungen
- AP2.3 Untersuchung von möglichen Wechselwirkungen aufeinanderfolgender Versatzmaterialien im Großmaßstab möglich durch zonaren Aufbau der Versatzkörper
- AP2.4 Bereitstellung einer Datenbasis für Salzforschungscommunity

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1: Das Monitoring der beiden Versatzkörper im Steinsalzbergwerk der GSES GmbH in Sondershausen wird weitergeführt. Es konnte nachgewiesen werden, dass kostengünstigere Sensoren nicht geeignet sind zum Einsatz in den gegebenen Bedingungen, da das Salz diese innerhalb weniger Tage korrodiert. Auch eine Vergoldung in Zusammenarbeit mit der Saxonia Galvanik GmbH erbrachte keine signifikante Verbesserung (AP 1.1 + AP 1.2).

AP2: Die in SAVER I entnommenen Proben wurden dem IfG für Porositäts-, Permeabilitäts-, Druck- und Scherversuche übergeben. Aktuell werden alle Proben ausgebaut und für die weitere Verwendung geprüft. Auf Grund der Materialeigenschaften von GESAV und KOMPASS-Material ist davon auszugehen, dass das GESAV-Material auf alle o. g. Parameter untersucht werden kann, während das KOMPASS-Material wahrscheinlich nicht konsolidiert genug ist. Die Ergebnisse seitens des IfG für o. g. Versuche sind noch ausstehend (AP2.1).

Die geochemischen Probenahmen wurden nach entsprechend angepasstem Intervall weitergenommen. Es konnten keine geochemischen Veränderungen beider Versatzkörper festgestellt werden. Des Weiteren sollten zur Analyse der Druckfestigkeit Kerne mit Hilfe einer Hilti-Kernbohrmaschine gewonnen werden. Dies gelang nur eingeschränkt. Auch das Heraussägen von Testblöcken gestaltet sich als technisch schwer realisierbar (siehe 9.) (AP2.2).

Die im Trockenschrank eingelagerten Proben wurden Druckversuchen unterzogen. Dabei zeigte sich, dass die bei 40 °C eingelagerten GESAV-Proben in der Spitze eine ca. 3-fache einaxiale Druckfestigkeit (1.600 kN/m²) gegenüber den Proben aufweisen, welche bei Raumtemperatur (550 kN/m²) gelagert wurden (AP2.2). Weiterhin findet keine Feuchtigkeitsmigration in die trocken verschleuderten Versatzkörperbereiche statt (AP2.3).

Die aufgenommenen Daten aus Labor und In-Situ werden kontinuierlich in lokale Datenbanken eingepflegt und visuell in Excel ausgewertet. Aktuelle Pläne für die Bereitstellung umfassen eine Realisierung mit der TUBAF-internen Cloud, wodurch Interessenten mit entsprechenden Zugangsrechten auf die Forschungsdaten ortsunabhängig zugreifen können (AP2.4).

4. Geplante Weiterarbeiten

AP1: Der Weiterbetrieb und das kontinuierliche Auslesen und Auswerten der untertägig generierten Daten wird entsprechend des Projektplanes weitergeführt. In einem weiterführenden Versuch sollen kapazitive Sensoren in Epoxid-Harz eingegossen werden und so auf eine mögliche Verwendung im Salz geprüft werden (AP1.1+1.2).

AP2: Die an das IfG übergebenen Proben sollen je nach technischer Möglichkeit auf alle geforderten Parameter untersucht werden (AP2.1).

Die Probennahmen für die geochemischen Untersuchungen werden fortgeführt (AP2.2). Kern- oder Blockentnahme wird nicht fortgeführt.

Die Untersuchung von Wechselwirkungen wird weiter durchgeführt durch die Auswertung der untertägig ausgelesenen Daten (AP2.3). Ebenfalls werden diese weiterhin in lokale Datenbanken eingepflegt. Die Nutzung der Cloud-Lösung der TUBAF sollte problemlos möglich sein, um die Datensätze mit anderen Institutionen in Zukunft zu teilen (AP2.4)

5. Berichte, Veröffentlichungen

Als zusätzlich parallel durchgeführte Forschung im Zuge einer Masterarbeit wurde der Einfluss von Behälterpositionierung in Einlagerungsstrecken untersucht. Laut bisherigem Stand in der Fachliteratur wurde davon ausgegangen, dass die POLLUX-Behälter auf der Sohle abgelegt werden und dann mit Versatz überhäuft werden. Da ein erhöhter Temperatureintrag in das Gebirge

die natürlich auftretende Konvergenz beschleunigt und wohlmöglich die Abkühlung der Behälter beschleunigt, wurde diese Hypothese im Zuge der Promotion von Herrn Schaarschmidt und der Master-Arbeit von Herrn Alsalamin untersucht. In Modellversuchen zeigte sich, dass das Versenken der Behälterattrappe in einem Graben auf dem Boden der simulierten Einlagerungsstrecke die Wärmeübertragung in das Gebirge gegenüber dem Versatz begünstigte. Auch bei den Abkühlungsversuchen konnte eine schnellere Abkühlung festgestellt werden, je tiefer der Behälter in der Sohle versenkt war. Die maximale untersuchte Grabentiefe entsprach 30 % des Behälterdurchmessers. Alle Ergebnisse dieser Untersuchungen konnten erfolgreich in der Fachzeitschrift „GeoResources“ im Zuge einer Sonderausgabe veröffentlicht werden.

Practical Model Approach for Relationship between POLLUX Emplacement Position and the Spatial Thermal Radiation in Dry Salt Grit Backfill; Ibrahim Alsalamin, Louis Schaarschmidt, Prof. Dr.-Ing. Helmut Mischo, TU Bergakademie Freiberg (TUBAF), Freiberg, Germany, 2024

URL:

<https://www.georesources.net/download/GeoResources%20Special%20-%20Practical%20Model%20Approach%20for%20Relationship%20between%20POLLUX%20Emplacement%20Position%20and%20the%20Spatial%20Thermal%20Radiation%20in%20Dry%20Salt%20Grit%20Backfill.pdf>

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 12184
Vorhabensbezeichnung: Flankierende nationale und internationale Vernetzung für Forschung und Kompetenzerhalt - Kurztitel Flanke		
Zuordnung zum FuE-Förderprogramm: C3.2 Methodische Grundlagen der Nachweisführung, C3.3 Werkzeuge der Sicherheitsanalysen D1.1 Methoden und Instrumente des Wissens- und Kompetenzmanagements. Relevant für alle Wirtsgesteine		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2024 bis 31.12.2025	Berichtszeitraum: 01.10.2024 bis 31.12.2024	
Gesamtkosten des Vorhabens: 428.750,65 EUR	Projektleiter: Dr. U. Noseck	

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Im Rahmen des Vorhabens werden die internationalen Entwicklungen zu allen Aspekten eines Safety Case durch Mitarbeit in internationalen Arbeitsgruppen mitgestaltet und die Ergebnisse im Hinblick auf ihre Bedeutung für Standortauswahlverfahren und Endlagerforschung in Deutschland ausgewertet damit Methoden Ansätze und Rechenprogramm dem internationalen Stan entsprechen.

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

TA 1: Teilnahme an internationalen Gremien, Arbeitsgruppen und Konferenzen

- Verfolgung und Bewertung internationaler Entwicklungen zu offenen Fragen und zur Weiterentwicklung von Strategien und methodischen Vorgehensweisen bei einem Safety Case inklusive Kommunikation und Wissenserhalt durch Mitarbeit in den internationalen Arbeitsgruppen Integration Group for the Safety Case (IGSC) und Working Party on Information, Data and Knowledge Management (WP-IDKM) der OECD/NEA.
- Diskussion und Weiterentwicklung von spezifischen technischen Aspekten, Modellen und Datensätzen für ausgewählte Endlagerformationen und geotechnische Barrieren zur Verwendung in Langzeitsicherheitsanalysen. Umsetzung durch Teilnahme an den Arbeiten des Clay Clubs, Salt Clubs und Crystalline Clubs der OECD/NEA sowie der Natural Analogue Working Group (NAWG), der internationalen Initiative Joint Sensitivity Analysis Exercise (JOSA), der Task Force Engineered Barrier Systems (TF EBS), der internationalen Arbeitsgruppe CatchNet und der internationalen Forschungsinitiative DEvelopment of COupled models and their VALidation against EXperiments (DECOVALEX).

TA 2: Projektleitung und Dokumentation

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- Teilnahme und Mitwirkung an dem IGSC Safety Case Symposium in Budapest als Mitglied des IGSC Next Generation Network (NGN) mit Posterpräsentation und Verfassen eines Konferenzpapers. Organisation und Leitung von virtuellen NGN-Treffen.
- Leitung des Safety Case Symposium 2024 und Leitung einzelner Sessions. Veröffentlichung von 5 Beiträgen zu IGSC und WP-IDKM Aktivitäten im Rahmen von Vorträgen und Posterbeiträgen. Leitung des IGSC-26 Plenary Meetings und Diskussion der Ergebnisse des Symposiums im Hinblick auf das Arbeitsprogramm der IGSC.
- Teilnahme am Planungstreffen für die neue Expertengruppe zu Archiving und Awareness Preservation (EGAAP) und Leitung der Sitzung zur Arbeitsgruppe SER (Set of Essential Records).
- Weiterführung der Arbeiten im Crystalline Club (CRC) an der Geochemistry Literature Database, Präsentation der CRC-Aktivitäten im IGSC-26 Plenary Meeting.
- Weiterführung der Analyse von Modellsystemen verschiedener Länder im Rahmen der gemeinsamen Aktivität zur Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse (JOSA). Fertigstellung der Dokumentation Teil 2, Planung der dritten Phase.
- Teilnahme am internationalen Vorhaben DECOVALEX 2027 mit Modellrechnungen für Salz und Kristallingestein; Planung der Rechenfälle und Durchführung vorläufiger Rechnungen; Teilnahme am DECOVALEX-Workshop im Oktober in Berlin.
- Teilnahme am Online-Meeting der Task Force EBS im September. Präsentation der Beschreibung von Task 14.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Mitorganisation eines Workshops zur Vernetzung zukünftiger Experten bei der safeND in Berlin im Rahmen des IGSC NGN. Organisation und Leitung weiterer NGN-Treffen zur Etablierung/Ausweitung des Netzwerkes.
- Organisation und Leitung des kommenden IGSC Core Group Treffens und des abschließenden Treffens des Programmkomitees für das SC Symposium 2024 sowie Review der Executive Summary zum Symposium. Weiterentwicklung des Arbeitsprogramms der IGSC und Erstellung einer Broschüre zum 25-jährigen Jubiläum. Weiterarbeit in der neuen Arbeitsgruppe GeneSiS der IGSC, Durchführung weiterer Interviews mit Organisationen aus Ländern, die in einem frühen Stadium des Endlagerprogramms sind.
- Teilnahme am IDKM Plenary Meeting sowie dem Kick-Off Meeting und Bureau Meeting der neuen Expertengruppe EGAAP. Leitung des Programm-Komitees und seiner Sitzungen zur Vorbereitung des „Symposiums on Information, Data and Knowledge Management for Radioactive Waste: Challenges Across All Timescales“ im Oktober 2025 in Yokohama.
- Leitung eines CRC Bureau Meetings, Weiterführung der Arbeiten an der Geochemistry Literature Database, Planung und Durchführung des CRC-8 Plenary Meetings.
- Vorbereitung einer neuen Arbeitsgruppe des Salt Clubs zur Umsetzung von Szenarien in langzeitsicherheitsanalytische Modelle.
- Abstimmung und Beginn der dritten Phase zur Analyse von Modellsystemen verschiedener Länder im Rahmen der gemeinsamen Aktivität zur Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse (JOSA).
- Durchführung weiterer Modellrechnungen für Salz und Kristallingestein im internationalen Vorhaben DECOVALEX 2027.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Gehrke, A., Javanmard, H., Rimando, J., Bailey, L., Brown, J., Voinis, S.: Creating a network for the next generation of safety case professionals. IGSC Safety Case Symposium, Budapest, Ungarn, Oktober 2024.

L.P. Swiler, Becker, D., Brooks, D., Koskinen, L., Kupiainen, P., Plischke, E., Röhlig, K.J., Samper, J., Spiessl, S.: Sensitivity Analysis Comparisons on Geologic Case Studies: An International Collaboration, Volume 2. Sandia Report, SAND2025-00230, January 2025.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 12194	
Vorhabensbezeichnung: Interaktionen zwischen den geotechnischen Barrieren eines Endlagers in tonreichen Sedimentgesteinsformationen - Phase 1 (INTERESE)			
Zuordnung zum FuE-Programm C 3.1 „Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCB) Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung “			
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2024 bis 30.09.2027		Berichtszeitraum: 01.10.2024 bis 31.12.2024	
Gesamtkosten des Vorhabens: 819.421,00 EUR		Projektleiter: Dr. Marvin Middelhoff	

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Das Ziel des Gesamtvorhabens ist die Reproduktion, Analyse und Bewertung der zeit- und maßstabsabhängigen thermisch, hydraulisch und mechanisch (THM) gekoppelten Prozesse in tonsteinbasierten Verschluss- und Versatz (VuV)-materialien mittels numerischer Simulationen, deren Durchführung die Verwendung des qualifizierten Stoffmodells „Barcelona Expensive Model“ (BExM) in Kombination des qualifizierten Codes „CODE_BRIGHT“ (CB) einschließt. Es ist auch eine Weiterentwicklung des BExM beabsichtigt, indem die Formulierung der mathematischen Funktionen zur Kopplung der Maßstäbe verbessert, und relevante Parameter zur chemischen Kopplung integriert werden.

Das Ziel der Vorhabensphase ist das Design von tonsteinbasierten VuV-Materialien sowie die Analyse der zeit- und maßstabsabhängigen thermisch, hydraulisch, mechanisch, chemisch (THMC) gekoppelten Prozessen (unter Berücksichtigung verschiedener VuV-Konzepte) mittels fortschrittlicher Experimente. Es ist auch beabsichtigt, dass im Rahmen der experimentellen Analyse das Verständnis bezüglich der ablaufenden Prozesse verbessert wird, sowie relevante Parameter (z.B. Kopplungs- oder weitere Kontrollparameter) identifiziert werden. Die experimentelle Analyse geht mit dem Aufbau einer robusten Datenbasis einher.

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

Das Vorhaben umfasst sieben Arbeitspakete (AP):

AP 1 und 2 adressiert die Projektorganisation bzw. -dokumentation.

AP 3 beabsichtigt Veränderungen des Materialverhaltens im Zenti- und Dekametermaßstab auf Veränderungen in der Mineralogie und der (Mikro-)Struktur der Materialien zurückzuführen. Dies wird mittels Prä- und Post-mortem-Feststoffanalysen sowie Interim-Lösungsanalysen erreicht. Das AP ist ergänzend zu den weiteren APs.

AP 4 beabsichtigt potenzielle tonsteinbasierte VuV-Materialien zu designen. Dies wird erreicht, indem die initialen Materialmerkmale so angepasst werden, dass das Volumenänderungs- sowie Fluidtransfer und -retentionsverhalten der Materialien möglichen Anforderungen an VuV-Materialien entsprechen.

AP 5 beabsichtigt den Einfluss des Spannungszustands auf das Volumenänderungsverhalten der potenziellen VuV-Materialien zu analysieren. Es werden auch Materialkennwerte, die sensitiv auf eine Veränderung des Experimentmaßstabs reagieren, identifiziert.

AP 6 beabsichtigt den zeitabhängigen Einfluss der Umweltbedingungen (Umgebungstemperatur, Lösungseigenschaften und -zusammensetzung) auf das Volumenänderungs- und Fluidtransferverhalten der potenziellen VuV-Materialien im Mikro- und Zentimetermaßstab zu analysieren. Die Bearbeitung einiger arbeitspaketbezogener Fragestellungen ist in den Rahmen des EURAD II – ANCHORS – Vorhaben eingebettet.

AP 7 beabsichtigt Interaktionen, welche in dem Fall auftreten, wenn Versatz und Verschlussbauwerk in direktem Kontakt sind, zu identifizieren, und den Einfluss dieser

Interaktionen auf die Funktion der Barrieren experimentell im Zenti- und Dekametermaßstab zu analysieren. Die Bearbeitung einiger arbeitspaketbezogener Fragestellungen ist in den Rahmen des EURAD II – ANCHORS – Vorhaben eingebettet.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Es ist im AP 2 angefangen worden, die relevante Literatur zu sichten, zusammenzustellen und zu synthetisieren. Ein Teilergebnis der Synthese ist die Formulierung einer generischen Methodik, welche genutzt werden kann, um VuV-Materialien unter Berücksichtigung des Endlagerkonzepts, der Versatz- und Verschlusstechniken und der (zeitabhängigen) thermischen, hydraulischen, mechanischen und chemischen Randbedingungen zu designen, auszuwählen und zu charakterisieren. Die Methodik ist auf einer internationalen Fachkonferenz vorgestellt worden.

Es ist im AP 7 eine Foto-Oedometer-Zelle konzipiert, produziert und ihre Funktionsweise validiert worden. Ihre Konfiguration erlaubt die Anwendung der Methoden 1. des Quellens in konstanten Volumenbedingungen, 2. des Quellens in freien Volumenbedingungen und 3. der konstanten Druckhöhe auf übereinander gestapelte Proben. Die Konfiguration lässt insbesondere zu, dass die Position der Grenzfläche zwischen den kompaktierten Proben bestimmt werden kann. Somit können Veränderungen in der Funktion der Barrieren den Grenzflächeninteraktionen zugeordnet werden. Die ersten Ergebnisse sind auf einer internationalen Fachkonferenz vorgestellt worden. Im Berichtszeitraum fand auch das Kick-Off-Meeting des EURAD II – ANCHORS – Vorhabens in Fontenay-aux-Roses (FR) statt.

4. Geplante Weiterarbeiten

Es ist die weitere Bearbeitung der einzelnen APs entsprechend der Vorhabensbeschreibung geplant.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Es sind folgende Beiträge im Berichtszeitraum veröffentlicht worden:

M. Middelhoff, J. Talandier. *Interactions at the interface between EBS-components of repository for nuclear waste in claystone formations*. 9. ClayConference, 25. – 28.11.2024, Hannover, Deutschland (Poster-Präsentation)

M. Middelhoff, C.-L. Zhang. *Crushed claystone used as a material to construct EBS-components of a repository for nuclear waste – A generic methodology for material selection*. 9. ClayConference, 25. – 28.11.2024, Hannover, Deutschland (Poster-Präsentation)

Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer: Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 12214A
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Multi-scale experimental and numerical analysis of crushed salt material used as engineered backfill for a nuclear waste repository in rock salt (MEASURES)		
Zuordnung zu den FuE-Feldern des Förderprogramms: C2.3: „Geotechnische und technische Barrieren“ C3.1: „Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische Phänomene und Prozesse“		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2024 bis 30.09.2027	Berichtszeitraum: 01.10.2024 bis 31.12.2024	
Gesamtkosten des Vorhabens: 772.844,00 EUR	Projektleiter: Larissa Friedenber	

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Das Gesamtziel des Vorhabens ist die Generierung einer experimentellen Datenbasis anhand eines definierten Salzgrusmaterials, welche zur systematischen Entwicklung und Kalibration von konstitutiven Stoffmodellen verwendet werden kann. Diese konstitutiven Modelle müssen (1) die beobachteten Phänomene abbilden können und (2) eine zuverlässige Extrapolation des Kompaktionsprozesses außerhalb des kalibrierten Bereiches liefern. Das Projekt MEASURES wird zur Verbesserung und Vertiefung des Prozessverständnisses der Salzgruskompaktion und der begleitenden Permeabilitätsentwicklung beitragen. Weiterhin werden die Ergebnisse des Vorhabens zur Reduktion der Unsicherheiten in Bezug auf das Langzeitverhalten von Salzgrus als geotechnische Barriere beitragen und somit die Prognosequalität für ein potenzielles Endlager für wärmeentwickelnde, radioaktive Abfälle im Steinsalz verbessern.

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

AP1: Laborstudien zur THM-gekoppelten Charakterisierung von Salzgrus

AP1.1: Verifikation und Bewertung der Vorkompaktionsmethoden

AP1.2: Langzeitkompaktionsversuche mit Fokus auf den Einfluss von Porosität, mittlere Spannung und Feuchte

AP1.3: Demonstration der hydraulischen Integrität

AP1.4: Fortführung der Kollaboration mit dem SAVER Projekt (FKZ 02E12173)

AP2: Mikrostrukturelle Untersuchungen

AP2.1: Experimente und mikrostrukturelle Studien zur Charakterisierung von mikrophysikalischen Prozessen welche die Porositäts-Permeabilitätsentwicklung kontrollieren

AP2.2: Generierung einer mikrophysikalischen Prozessliste

AP3: Numerische Modellierung

AP3.1: Benchmarkrechnungen, Modelentwicklung und -optimierung

AP3.2: Virtueller Demonstrator

AP3.3: Update der Permeabilitätsfunktion für die Langzeitsicherheitsanalyse

AP4: Dokumentation und Synthese

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Das Projekt startete mit dem hybriden Kick-off Meeting am 09.12.2024 in Braunschweig. Dort wurde ein Überblick über das Projekt gegeben und die einzelnen Partner stellten ihre für das Projekt geplanten Arbeiten vor. Es wurden zudem Diskussionsbeiträge geliefert, wie zum Beispiel über Unsicherheiten im Projekt, die Einstellung von Feuchtegehalten bei den Kompaktionsversuchen und generelle Betrachtungen bei der Verwendung von Salzgrus als Versatzmaterial. Grundsätzliche Fragen der angestrebten Reproduzierbarkeit, Repräsentativität sowie Homogenität/Isotropie der laborativ vorkompaktierten und kompaktierten Proben hinsichtlich des aktuellen Standes und der festgestellten Mängel wurden diskutiert. Mögliche zukünftige Kooperationsmöglichkeiten und das weitere Vorgehen wurden von der Projektkoordinatorin vorgestellt und mit den Partnern diskutiert.

4. Geplante Weiterarbeiten

Bearbeitung des Projekts anhand der Arbeitspakete aus Punkt 2.

5. Berichte, Veröffentlichungen

- Keine -

Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer: BGE TECHNOLOGY GmbH, Eschenstraße 55, 31224 Peine		Förderkennzeichen: 02 E 12214B	
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Multi-scale experimental and numerical analysis of crushed salt material used as engineered backfill for a nuclear waste repository in rock salt (MEASURES), Teilprojekt B"			
Zuordnung zu den FuE-Feldern des Förderprogramms: C2.3 Geotechnische und technische Barrieren C3.1 Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-)Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung			
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2024 bis 30.09.2027		Berichtszeitraum: 01.10.2024 bis 31.12.2024	
Gesamtkosten des Vorhabens: 383.875,00 EUR		Projektleiter: Herr Michael Rahmig	

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Das Gesamtziel des Vorhabens ist die Generierung einer experimentellen Datenbasis anhand eines definierten Salzgrusmaterials, welche zur systematischen Entwicklung und Kalibration von konstitutiven Stoffmodellen verwendet werden kann. Diese konstitutiven Modelle müssen (1) die beobachteten Phänomene abbilden können und (2) eine zuverlässige Extrapolation des Kompaktionsprozesses außerhalb des kalibrierten Bereiches liefern. Das Projekt MEASURES wird zur Verbesserung und Vertiefung des Prozessverständnisses der Salzgruskompaktion und der begleitenden Permeabilitätsentwicklung beitragen. Weiterhin werden die Ergebnisse des Vorhabens zur Reduktion der Unsicherheiten in Bezug auf das Langzeitverhalten von Salzgrus als geotechnische Barriere beitragen und somit die Prognosequalität für ein potenzielles Endlager für wärmeentwickelnde, radioaktive Abfälle im Steinsalz verbessern.

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

Die Laboruntersuchungen in **AP 1 („Experimentelle Untersuchungen zur THM-gekoppelten Charakterisierung von Salzgrus“)** sollen der Beschreibung des thermo-hydro-mechanischen Verhaltens von Salzgrus dienen, indem in AP1.1 die Vorkompaktionsmethoden bewertet und überprüft, in AP1.2 Langzeitversuche zur Berücksichtigung des Einflusses von Porosität, mechanischer Spannung und Feuchtigkeit durchgeführt, in AP1.3 die hydraulischen Eigenschaften während des Kompaktionsprozesses untersucht und in AP1.4 das Zusammenarbeiten mit dem SAVER Projekt (FKZ 02E12173) fortgesetzt werden. **„Mikrostrukturelle Untersuchungen“ (AP2)** zielen auf mikrophysikalische Prozesse ab, welche die Porosität/Permeabilität beeinflussen (AP 2.1). Die Zusammenstellung von mikrostrukturellen Prozessen und zugehörigen resultierenden Mikrostrukturen erfolgt in AP 2.2. **„Numerische Modellierung“ (AP3)** beinhaltet Benchmark-Berechnungen, Stoffmodellweiterentwicklungen sowie deren Optimierung auf Basis der Laborversuche (AP3.1), einen virtuellen Demonstrator (AP3.2) der den Demonstrator aus KOMPASS II um Einflussfaktoren erweitert und für Untersuchungen zur Verlässlichkeit und zu Ungewissheiten genutzt wird und die Aktualisierung der funktionalen Abhängigkeit der Permeabilität für die Langzeitsicherheitsanalyse (AP 3.3). **„Dokumentation und Synthese“ (AP4)** enthält die zu erstellenden Fortschrittsberichte, den finalen Abschlussbericht sowie die Präsentation des Projektstatus im Rahmen von nationalen und internationalen Konferenzen.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Das Kick-off Meeting zum Projekt MEASURES fand als hybride Veranstaltung am 09.12.2024 in Braunschweig statt. Auf diesem Projekttreffen wurde ein Vortrag zum Thema der projektspezifischen Ungewissheiten durch die BGE TEC präsentiert. Die Projektpartner stellten die geplanten Projektarbeiten vor. Es wurden zudem Diskussionsbeiträge geliefert, wie zum Beispiel über Unsicherheiten im Projekt, die Einstellung von Feuchtegehalten bei den Kompaktionsversuchen und generelle Betrachtungen bei der Verwendung von Salzgrus als Versatzmaterial. Grundsätzliche Fragen der angestrebten Reproduzierbarkeit, Repräsentativität sowie Homogenität/Isotropie der laborativ vorkompaktierten und kompaktierten Proben wurden unter Berücksichtigung des neuen Wissenstandes, resultierend aus dem seit Projektstart durchgeführten Vorkompaktionsversuchen, diskutiert.

Mögliche zukünftige Kooperationsmöglichkeiten (z.B. mit einem Salzbergbauunternehmen zur zusätzlichen Erkenntnisgewinnung) und das weitere Vorgehen im Projekt, sowie wichtige Termine wurden von der Projektkoordinatorin vorgestellt und mit den Partnern besprochen.

Die Arbeit der BGE TEC erfolgte in dem **Arbeitspaket 3 (hier nur AP 3.1)**.

AP 3.1

Auf Basis der Erkenntnisse aus dem KOMPASS Projekten zu noch fehlenden Teilprozessen im Stoffmodell der BGE TEC zu Salzgrus wurde zunächst eine Priorisierung für dessen Erweiterung um weitere Teilprozesse vorgenommen. Damit wird das Ziel verfolgt, das Verhalten des Salzgruses noch besser extrapolieren zu können.

Zu dem Einfluss der Geometrie des Salzgruses respektive der Salzgruskörner auf das Drucklösungskriechen wurden Gedankenexperimente durchgeführt. Dies ist notwendig um das Stoffmodell mit dem Drucklösungskriechen korrekt erweitern zu können.

Des Weiteren wurde eine Qualifizierung von Ungewissheiten im Zusammenhang mit der numerischen Modellierung vorgenommen, um darauf aufbauend eine Quantifizierung von Ungewissheiten durchführen zu können. Die Basis für die Qualifizierung waren hierbei aus anderen Projekten gewonnene Erkenntnisse bezüglich des Themas Ungewissheiten.

4. Geplante Weiterarbeiten

Zunächst werden Arbeiten zur Erweiterung des Stoffmodells der BGE TEC für Salzgrus fortgesetzt. Im nächsten Schritt erfolgt eine Parametrisierung des Modells anhand der vorhandenen Daten aus Laborexperimenten. Dabei sollen bisher unversuchte statistische Analysemethoden auf die Daten der Laborexperimente angewendet werden, um mögliche Messfehler kompensieren zu können. Auch die Ergebnisse der Parametrisierung werden einer umfangreichen statistischen Analyse unterzogen. Zudem werden Grundlagenanalysen im Bereich der Ungewissheiten im Kontext des Projektes fortgeführt.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Im Berichtszeitraum wurden keine Veröffentlichungen vorgenommen.

Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer: IfG Institut für Gebirgsmechanik GmbH, Friederickstraße 60, 04279 Leipzig		Förderkennzeichen: 02 E 12214C
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Multi-scale experimental and numerical analysis of crushed salt material used as engineered backfill for a nuclear waste repository in rock salt (MEASURES)		
Zuordnung zu den FuE-Feldern des Förderprogramms: C2.3: „Geotechnische und technische Barrieren“ C3.1: „Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische Phänomene und Prozesse“		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2024 bis 30.09.2027	Berichtszeitraum: 01.10.2024 bis 31.12.2024	
Gesamtkosten des Vorhabens: 337.741,00 EUR	Projektleiter: Dr. Christoph Lüdeling	

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Das Gesamtziel des Vorhabens ist die Generierung einer experimentellen Datenbasis anhand eines definierten Salzgrusmaterials, welche zur systematischen Entwicklung und Kalibration von konstitutiven Stoffmodellen verwendet werden kann. Diese konstitutiven Modelle müssen (1) die beobachteten Phänomene abbilden können und (2) eine zuverlässige Extrapolation des Kompaktionsprozesses außerhalb des kalibrierten Bereiches liefern. Das Projekt MEASURES wird zur Verbesserung und Vertiefung des Prozessverständnisses der Salzgruskompaktion und der begleitenden Permeabilitätsentwicklung beitragen. Weiterhin werden die Ergebnisse des Vorhabens zur Reduktion der Unsicherheiten in Bezug auf das Langzeitverhalten von Salzgrus als geotechnische Barriere beitragen und somit die Prognosequalität für ein potenzielles Endlager für wärmeentwickelnde, radioaktive Abfälle im Steinsalz verbessern.

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

AP1: Laborstudien zur THM-gekoppelten Charakterisierung von Salzgrus

AP1.1: Verifikation und Bewertung der Vorkompaktionsmethoden

AP1.2: Langzeitkompaktionsversuche mit Fokus auf den Einfluss von Porosität, mittlere Spannung und Feuchte

AP1.3: Demonstration der hydraulischen Integrität

AP1.4: Fortführung der Kollaboration mit dem SAVER Projekt (FKZ 02E12173)

AP2: Mikrostrukturelle Untersuchungen

AP2.1: Experimente und mikrostrukturelle Studien zur Charakterisierung von mikrophysikalischen Prozessen welche die Porositäts-Permeabilitätsentwicklung kontrollieren

AP2.2: Generierung einer mikrophysikalischen Prozessliste

AP3: Numerische Modellierung

AP3.1: Benchmarkrechnungen, Modelentwicklung und -optimierung

AP3.2: Virtueller Demonstrator

AP3.3: Update der Permeabilitätsfunktion für die Langzeitsicherheitsanalyse

AP4: Dokumentation und Synthese

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Das Projekt startete mit dem hybriden Kick-off Meeting am 09.12.2024 in Braunschweig. Dort wurde ein Überblick über das Projekt gegeben und die einzelnen Partner stellten ihre für das Projekt geplanten Arbeiten vor. Es wurden zudem Diskussionsbeiträge geliefert, wie zum Beispiel über Unsicherheiten im Projekt, die Einstellung von Feuchtegehalten bei den Kompaktionsversuchen und generelle Betrachtungen bei der Verwendung von Salzgrus als Versatzmaterial. Grundsätzliche Fragen der angestrebten Reproduzierbarkeit, Repräsentativität sowie Homogenität/Isotropie der laborativ vorkompaktierten und kompaktierten Proben hinsichtlich des aktuellen Standes und der festgestellten Mängel wurden diskutiert. Mögliche zukünftige Kooperationsmöglichkeiten und das weitere Vorgehen wurden von der Projektkoordinatorin vorgestellt und mit den Partnern diskutiert.

4. Geplante Weiterarbeiten

Bearbeitung des Projekts anhand der Arbeitspakete aus Punkt 2.

5. Berichte, Veröffentlichungen

- Keine -

Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer: TU Clausthal - Lehrstuhl für Geomechanik und multiphysikalische Systeme		Förderkennzeichen: 02 E 12214D
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Multi-scale experimental and numerical analysis of crushed salt material used as engineered backfill for a nuclear waste repository in rock salt (MEASURES)		
Zuordnung zu den FuE-Feldern des Förderprogramms: C2.3: „Geotechnische und technische Barrieren“ C3.1: „Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische Phänomene und Prozesse...“		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2024 bis 30.09.2027	Berichtszeitraum: 01.10.2024 bis 31.12.2024	
Gesamtkosten des Vorhabens: 498.630,00 EUR	Projektleiter: Dr.-Ing. Svetlana Lerche	

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Das Gesamtziel des Vorhabens ist die Generierung einer experimentellen Datenbasis anhand eines definierten Salzgrusmaterials, welche zur systematischen Entwicklung und Kalibration von konstitutiven Stoffmodellen verwendet werden kann. Diese konstitutiven Modelle müssen (1) die beobachteten Phänomene abbilden können und (2) eine zuverlässige Extrapolation des Kompaktionsprozesses außerhalb des kalibrierten Bereiches liefern. Das Projekt MEASURES wird zur Verbesserung und Vertiefung des Prozessverständnisses der Salzgruskompaktion und der begleitenden Permeabilitätsentwicklung beitragen. Weiterhin werden die Ergebnisse des Vorhabens zur Reduktion der Unsicherheiten in Bezug auf das Langzeitverhalten von Salzgrus als geotechnische Barriere beitragen und somit die Prognosequalität für ein potenzielles Endlager für wärmeentwickelnde, radioaktive Abfälle im Steinsalz verbessern.

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

AP1: Laborstudien zur THM-gekoppelten Charakterisierung von Salzgrus

AP1.1: Verifikation und Bewertung der Vorkompaktionsmethoden

AP1.2: Langzeitkompaktionsversuche mit Fokus auf den Einfluss von Porosität, mittlerer Spannung und Feuchte

AP1.3: Demonstration der hydraulischen Integrität

AP1.4: Fortführung der Kollaboration mit dem SAVER Projekt (FKZ 02E12173)

AP2: Mikrostrukturelle Untersuchungen

AP2.1: Experimente und mikrostrukturelle Studien zur Charakterisierung von mikrophysikalischen Prozessen welche die Porositäts-Permeabilitätsentwicklung kontrollieren

AP2.2: Generierung einer mikrophysikalischen Prozessliste

AP3: Numerische Modellierung

AP3.1: Benchmarkrechnungen, Modelentwicklung und -optimierung

AP3.2: Virtueller Demonstrator

AP3.3: Update der Permeabilitätsfunktion für die Langzeitsicherheitsanalyse

AP4: Dokumentation und Synthese

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Das Projekt startete mit dem hybriden Kick-off Meeting am 09.12.2024 in Braunschweig. Dort wurde ein Überblick über das Projekt gegeben und die einzelnen Partner stellten ihre für das Projekt geplanten Arbeiten vor. Es wurden zudem Diskussionsbeiträge geliefert, wie zum Beispiel über Unsicherheiten im Projekt, die Einstellung von Feuchtegehalten bei den Kompaktionsversuchen und generelle Betrachtungen bei der Verwendung von Salzgrus als Versatzmaterial. Grundsätzliche Fragen der angestrebten Reproduzierbarkeit, Repräsentativität sowie Homogenität/Isotropie der laborativ vorkompaktierten und kompaktierten Proben hinsichtlich des aktuellen Standes und der festgestellten Mängel wurden diskutiert. Mögliche zukünftige Kooperationsmöglichkeiten und das weitere Vorgehen wurden von der Projektkoordinatorin vorgestellt und mit den Partnern diskutiert.

4. Geplante Weiterarbeiten

Bearbeitung des Projekts anhand der Arbeitspakete aus Punkt 2.

5. Berichte, Veröffentlichungen

- Keine -

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 12224A	
Vorhabensbezeichnung: Rückhaltung und Löslichkeit dosisrelevanter Radionuklide unter den reduzierenden Nahfeldbedingungen eines Endlagers in Ton- oder Kristallingestein. Teilprojekt GRS (RULET-GRS)			
Zuordnung zum FuE-Programm: C3.1: Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-) Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung			
Laufzeit des Vorhabens: 01.11.2024 bis 30.04.2028		Berichtszeitraum: 01.11.2024 bis 31.12.2024	
Gesamtkosten des Vorhabens: 533.752,00 EUR		Projektleiter: Dr. Sven Hagemann	

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

In Ausbreitungsrechnungen im Rahmen von Langzeitsicherheitsbewertungen von Endlagern für hochradioaktive Abfälle sind Spalt-, Aktivierungs- und Zerfallsprodukte (z.B. ^{14}C , ^{79}Se , ^{99}Tc und ^{226}Ra) für einen Großteil der berechneten Dosisleistung verantwortlich. Es besteht daher ein besonderes Interesse, das Verhalten dieser Radionuklide im Nahfeld eines Endlagers besser zu verstehen, auch um ggf. relevante Rückhaltungs- und Mobilisierungsprozesse bei Transportrechnungen explizit berücksichtigen zu können.

Mit dem Verbundprojekt RULET soll das Verständnis der physikochemischen Prozesse (Komplexbildung, Redoxreaktionen, Rückhaltung durch Sorption und Festphasenbildung) vertieft werden, die zu einer effektiven Rückhaltung von ^{14}C , ^{79}Se , ^{99}Tc und ^{226}Ra durch carbonatische und silikatische Festphasen führen. Im Fokus stehen dabei Festphasen, Oxidationsstufen und Lösungsspezies, wie sie im unmittelbaren Umfeld der Abfallcontainer zu erwarten sind. Ein besonderer Fokus liegt dabei auf Reaktionen und Gleichgewichten an und um Eisen(II)-haltige Korrosionsphasen.

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

- AP1: Lösungsspeziation und Bildung von Festphasen bei Technetium, besonders Tc^{IV} sowie anderer vierwertiger Radionuklide
- AP2: Rückhalteprozesse an silikathaltigen Mineralen
- AP3: Rückhalteprozesse an Carbonat-Mineralen
- AP4: Synthese der Ergebnisse und Integration in Stoffausbreitungsmodelle
- AP5: Nachwuchsförderung, Wissenschaftliche Vernetzung und Dokumentation

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1: Zur Herstellung von reinen Stannat(IV)-Stammlösungen wurden Methoden entwickelt und Chemikalien beschafft.

AP2 und AP3: Für die vorgesehenen Sorptions- und Reduktionsversuche in AP2 und AP3 werden Fe(II)-haltige Carbonate und Silikate benötigt. Auf der Basis von in der Literatur dokumentierten Synthesemöglichkeiten wurden eine Reihe von Verbindungen und Synthesewegen identifiziert, die hierfür in Frage kommen. Eine Festlegung auf bestimmte Verbindungen erfolgt in Absprache mit dem Konsortium Anfang 2025.

AP5: Für die zweite Jahreshälfte 2025 wurden gemeinsam mit dem HZDR Zeitpunkt und Inhalte eines gemeinsamen Workshops RULET/TecRad (NukSiFutur-Nachwuchsgruppe) diskutiert.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP1: Zusammenstellung von Daten (Löslichkeiten, Komplexbildung, Aktivitätskoeffizienten) zu Systemen mit vierwertigen Metallionen (M^{IV})

Synthese und Charakterisierung von Stammlösungen von Natrium- und Kaliumstannat(IV) zur Verwendung in isopiestic und Löslichkeitsuntersuchungen.

AP2: Synthese ausgewählter eisen(II)-haltiger Carbonate und Aufbau einer Apparatur zur Synthese von Fe(II)-haltigen Tonmineralen

AP5: Weitere Planung zum gemeinsamen RULET/ TecRad-Workshop

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer: Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e.V. Bautzner Landstrasse 400, 01328 Dresden		Förderkennzeichen: 02 E 12224B
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Rückhaltung und Löslichkeit dosisrelevanter Radionuklide unter den reduzierenden Nahfeldbedingungen eines Endlagers im Ton- oder Kristallingestein (RULET), Teilprojekt B		
Zuordnung zu den FuE-Feldern des Förderprogramms: C3.1 Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-)Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung		
Laufzeit des Vorhabens: 01.11.2024 bis 30.04.2028	Berichtszeitraum: 01.11.2024 bis 31.12.2024	
Gesamtkosten des Vorhabens: 646.501,00 EUR	Projektleiter: Dr. Katharina Müller	

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Das Verbundprojekt RULET beschäftigt sich mit den sicherheitsrelevanten physikochemischen Eigenschaften und der Rückhaltung von ^{99}Tc , ^{79}Se , ^{226}Ra und ^{14}C im Nahfeld eines Endlagers. Im Fokus stehen dabei Festphasen, Oxidationsstufen und Lösungsspezies, wie sie im unmittelbaren Umfeld der Abfallcontainer zu erwarten sind. Das Ziel ist Konservativitäten in den Annahmen, die derzeit für diese Radionuklide in Langzeitsicherheitsnachweisen angenommen werden, abzubauen. Dafür erfolgt eine enge Zusammenarbeit zwischen der Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Braunschweig, dem Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf (HZDR), dem Karlsruhe Institut für Technologie (KIT), und dem Forschungszentrum Jülich (FZJ). Ziel des Teilvorhabens des HZDR ist die Identifikation von Rückhalteprozessen für das Spaltprodukt ^{99}Tc und im geringeren Umfang für ^{79}Se an Eisen(II)-Carbonatmineralen. Dabei werden auch konkurrierende Reaktionen erfasst, sowie der Einfluss des Redoxzustandes untersucht. Neben Batchversuchen sind spektroskopische Speziesnachweise ein wichtiger Bestandteil der Untersuchungen. Thermodynamische Daten werden ermittelt und im Fall hinreichender Qualifizierung in die Referenzdatenbasis THEREDA implementiert. Sorptionsparameter werden in die mineralspezifische Sorptionsdatenbank RES³T eingebunden. Ein weiteres Ziel stellt die Untersuchung und Charakterisierung der relevanten niederen Oxidationsstufen des ^{99}Tc und deren Komplexbildung mit anorganischen Liganden dar.

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

- AP 1: Lösungsspeziation und Bildung von Festphasen bei Technetium, besonders Tc^{IV} sowie anderer vierwertiger Radionuklide
- AP 2: Rückhalteprozesse an silikathaltigen Mineralen
- AP 3: Rückhalteprozesse an Carbonat-Mineralen
- AP 4: Synthese der Ergebnisse und Integration in Stoffausbreitungsmodelle
- AP 5: Nachwuchsförderung, Wissenschaftliche Vernetzung und Dokumentation

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP 1, AP 3: Bisher wurden noch keine signifikanten Untersuchungen durchgeführt, da noch kein Personal eingestellt wurde. Es erfolgten lediglich in-kind-Arbeiten zur Ertüchtigung der Laborarbeitsplätze und zum Screening der thermodynamischen Daten für die im Projekt adressierten Stoffsysteme.

AP 5: Planung des RULET Vernetzungworkshops. Dieser wird vom 24. bis 27.11.2025 am HZDR stattfinden und mit Aktivitäten der BMBF geförderten NukSiFutur Nachwuchsgruppe TecRad abgestimmt.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP 1, AP 3: Zusammenstellung der Literaturrecherche, Auswahl und Beschaffung der Fe^{II}-Carbonatmineralphasen

AP 5: Detailplanung des Workshops

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine

Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer: Karlsruher Institut für Technologie (Großforschungsaufgabe)		Förderkennzeichen: 02 E 12224C
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Rückhaltung und Löslichkeit dosisrelevanter Radionuklide unter den reduzierenden Nahfeldbedingungen eines Endlagers im Ton- oder Kristallingestein (RULET), Teilprojekt C		
Zuordnung zum FuE-Programm: C3.1 „Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-)Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung“		
Laufzeit des Vorhabens: 01.12.2024 bis 31.05.2028	Berichtszeitraum: 01.12.2024 bis 31.12.2024	
Gesamtkosten des Vorhabens: 547.253,00 EUR	Projektleiter: Dr. Xavier Gaona	

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Das Teilprojekt von KIT-INE vertieft das Verständnis der physikochemischen Prozesse (Komplexbildung, Redoxreaktionen, Rückhaltung durch Sorption und Festphasenbildung), die zu einer effektiven Rückhaltung von Technetium-99 und Kohlenstoff-14 durch silikatische Festphasen führen. Im Fokus stehen dabei Festphasen, Oxidationsstufen und Lösungsspezies, wie sie im unmittelbaren Umfeld der Abfallcontainer zu erwarten sind. Ein besonderer Fokus liegt dabei auf Reaktionen und Gleichgewichten an und um eisen(II)-haltigen Korrosionsphasen, die Retention von Kohlenstoff-14 wird zudem auch an Tonmineralien bzw. Zementsystemen untersucht. Die Erkenntnisse der Untersuchungen aller Projektpartner werden zusammengefasst und in einem vereinfachten Stoffausbreitungsmodell für ein generisches Endlager eingesetzt. Hiermit wird geprüft, ob die neuen Erkenntnisse zu einer Reduzierung von Konservativitäten beitragen konnten, oder ob neue bislang nicht berücksichtigte mobilitätssteigernde Prozesse überwiegen. Auf Basis der Ergebnisse werden Empfehlungen abgeleitet, in welcher Form die gefundenen Rückhalte- und Mobilisierungsmechanismen bei Sicherheitsbewertungen berücksichtigt werden sollten. Die in diesem Vorhaben erhaltenen Ergebnisse erweitern darüber hinaus die physikalisch-chemische Datengrundlage, die für thermodynamische Berechnungen des Quellterms wie auch für reaktive Stofftransportmodelle benötigt werden.

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

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

AP 1: Lösungsprozesse.

AP 2: Rückhaltung an Silicaten.

AP 3: Rückhaltung an Carbonaten.

AP 4: Synthese & Integration in Stoffausbreitungsmodelle.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im ersten, nur einmonatigen, Berichtszeitraum wurden von KIT-INE in RULET die folgenden Arbeiten durchgeführt, die im Wesentlichen auf der Suche nach geeigneten Bewerber/innen für die beiden Doktorandenstellen fokussierten. Die beiden Doktorarbeiten sollen in den Arbeitspaketen AP 1 + AP 2 (Tc-99) und AP 2 (C-14) durchgeführt werden.

AP 1: Die Ausschreibung der Doktorandenstellen wurde intern am KIT-INE erstellt. KIT wird die Ausschreibung im Januar / Februar 2025 intern und extern über verschiedene Plattformen veröffentlichen.

AP 2: Die Ausschreibung der Doktorandenstellen wurde intern am KIT-INE erstellt. KIT wird die Ausschreibung im Januar / Februar 2025 intern und extern über verschiedene Plattformen veröffentlichen.

AP 3: Keine Aktivitäten.

AP 4: Keine Aktivitäten.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP 1: Die Suche nach geeigneten Bewerber/innen für die Doktorandenstellen in AP 1 wird weitergeführt. Auswahl geeigneter Bewerber/innen und ggf. Abschluss des Doktorandenvertrags.

AP 2: Die Suche nach geeigneten Bewerber/innen für die Doktorandenstellen in AP 2 wird weitergeführt. Auswahl geeigneter Bewerber/innen und ggf. Abschluss des Doktorandenvertrags.

AP 3: Keine Aktivitäten geplant.

AP 4: Keine Aktivitäten geplant.

5. Berichte, Veröffentlichungen

keine

Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer: Forschungszentrum Jülich GmbH, Institute of Fusion Energy and Nuclear Waste Management – Nukleare Entsorgung (IFN-2)		Förderkennzeichen: 02 E 12224D
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Rückhaltung und Löslichkeit dosisrelevanter Radionuklide unter den reduzierenden Nahfeldbedingungen eines Endlagers im Ton- oder Kristallingestein (RULET), Teilprojekt D		
Zuordnung zu den FuE-Feldern des Förderprogramms: C3.1 Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-)Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung		
Laufzeit des Vorhabens: 01.11.2024 bis 30.04.2028	Berichtszeitraum: 01.11.2024 bis 31.12.2024	
Gesamtkosten des Vorhabens: 573.943 EUR	Projektleiter: Dr. Jenna Poonoosamy	

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Im Rahmen des Verbundvorhabens RULET soll das Verständnis physikochemischer Prozesse (u. a. Komplexbildung, Redoxreaktionen, Rückhaltung durch Sorption und Festphasen-bildung) vertieft werden, die zu einer effektiven Rückhaltung von ^{14}C , ^{79}Se , ^{99}Tc und ^{226}Ra durch carbonatische und silikatische Festphasen und Sekundärminerale führen. Im Fokus stehen dabei Prozesse, die im Endlagernahfeld im unmittelbaren Umfeld der Abfallbehälter zu erwarten sind. Die gewonnenen Erkenntnisse und Daten werden in vereinfachte Stoff-ausbreitungsmodelle für ein generisches Endlager eingesetzt, um zu prüfen, ob die gewonnen Erkenntnisse zu einer Reduzierung von Konservativitäten beitragen können, oder ob bislang unberücksichtigte mobilitätssteigernde Prozesse überwiegen. Ziel des Teilprojekts D ist es, durch Integration von innovativen mikrofluidischen „Lab-on-Chip“ Experimenten und Simulationen ein umfassendes Verständnis der Retention von ^{226}Ra durch Carbonatminerale im Endlagernahfeld zu gewinnen, ausgehend von thermodynamischen und kinetischen Ansätzen für „Solid solution – Aqueous solution“ Systeme. Des Weiteren sind Untersuchungen des Einflusses des Transportregimes (diffusiv/advektiv) auf den Einbau von Se(IV) in Fe(II)-haltige Carbonate, insb. auch in Bezug auf Polymorphie der Carbonatphasen und Einbaukinetik vorgesehen.

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

Das Untersuchungsprogramm des Verbundvorhabens RULET ist in fünf Arbeitspakete (AP) untergliedert:

- AP1 Lösungsspeziation und Bildung von Festphasen bei Technetium, besonders Tc^{IV} sowie anderer vierwertiger Radionuklide
- AP2 Rückhalteprozesse an silikathaltigen Mineralen
- AP3 Rückhalteprozesse an Carbonat-Mineralen
- AP4 Synthese der Ergebnisse und Integration in Stoffausbreitungsmodelle
- AP5 Nachwuchsförderung, wissenschaftliche Vernetzung und Dokumentation

Die vom FZJ-IFN-2 im Rahmen von RULET durchgeführten Arbeiten liefern Beiträge zu den Arbeitspaketen AP3 und AP5.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Die im Berichtszeitraum durchgeführten vorbereitenden Arbeiten betrafen die Veröffentlichung von Stellenausschreibungen für die Besetzung der Positionen der Nachwuchswissenschaftler sowie Vorbereitungsarbeiten zur Beschaffung und Installation eines regelbaren True-Power Lasers (Diodenlaser mit 633 nm Wellenlänge; Ausgangsleistung 50 mW) zur Optimierung der 4D Raman-Spektroskopie/Tomographie der Mikrofluidikanlage.

4. Geplante Weiterarbeiten

Der Schwerpunkt der für das nächste Halbjahr geplanten Arbeiten betrifft initiale Arbeiten im Rahmen des AP3. Dies umfasst i. W. konzeptionelle Arbeiten zur Planung und Vorbereitung von Mikrofluidikexperimenten (u. a. zu Chipdesign und Simulation der hydrodynamischen Verhältnisse) ausgehend von den Erfahrungen und Ergebnissen aus dem VESPA II Vorhaben. Des Weiteren sind die Durchführung von Literaturrecherchen und konzeptioneller Arbeiten zur Vorbereitung atomistischer *ab initio* Simulationen zu den thermodynamischen Eigenschaften von (Ca,Ra)-Carbonat Mischkristallsystemen unter Verwendung von DFT-Ansätzen vorgesehen (u. a. Entwicklung geeigneter Superzellen für verschiedene CaCO₃ Polymorphe und Doppelcarbonate).

5. Berichte, Veröffentlichungen

keine

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 12234A	
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Bewertung der Integrität von Endlagerbehältern unter Korrosionseinfluss im Kristallingestein (BEnKo), Teilprojekt A			
Zuordnung zum FuE-Programm: C2.1 Sicherheits- und Endlagerkonzepte: Weiterentwicklung generischer Sicherheits- und Endlagerkonzepte für die drei Wirtsgesteinstypen (inkl. Endlagerauslegung, Bergbau- und Bautechnik, Ausbau, Behälterkonzepte, Abfallformen etc.); C2.3 Geotechnische und technische Barrieren: Erforschung und Entwicklung von Behälterkonzepten und Behältermaterialien, die im Endlagersystem auch eine Funktion als wesentliche Barrieren)			
Laufzeit des Vorhabens: 01.11.2024 bis 31.10.2026		Berichtszeitraum: 01.11.2024 bis 31.12.2024	
Gesamtkosten des Vorhabens: 414.020,00 EUR		Projektleiter: Heike Mönig	

1. Vorhabenziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Das übergeordnete Ziel des Verbundprojektes ist die Schaffung der methodischen Grundlagen zur Bewertung der Integrität von Endlagerbehältern. Diese sollen vergleichbare und robuste Aussagen zur Integritätsbewertung und zur Stabilität von Behältern unter korrosiven Randbedingungen einer Endlagerung im Kristallingestein ermöglichen. Damit wird eine wesentliche Basis für die Entwicklung von Behälterkonzepten geschaffen.

Die Ermittlung geochemischer und physikalische Randbedingungen an möglichen Endlagerstandorten dient dazu, die Bandbreite potenzieller Korrosionsbedingungen zu identifizieren. Darauf aufbauend werden offene Fragen und Kenntnislücken ermittelt, die für zukünftige Korrosionsuntersuchungen von Bedeutung sind.

Im Ergebnis soll das Vorhaben wichtige wissenschaftliche und materialtechnische Grundlagen für die Auswahl geeigneter Behältermaterialien und die Entwicklung von Behälterkonzepten liefern. Da es sich um ein generisches Konzept handelt, können die entwickelten Methoden auch auf andere Wirtsgesteine und Behältermaterialien übertragen werden und somit einen breiteren wissenschaftlichen und technischen Nutzen bieten.

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

- AP1: Nachweisverfahren zur Bewertung der Integrität nach einlagerungsbedingter Korrosion
- AP2: Zusammenstellung von Randbedingungen, die für die Bewertung der Korrosion von Behältermaterialien relevant sind
- AP3: Identifizierung von offenen Fragestellungen, die für die Bandbreite der Kristallingestein-Teilgebiete relevant sind
- AP4: Modelle zur Behälterintegrität
- AP5: Projektkoordination und Qualitätsmanagement

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Das Vorhaben begann offiziell am 01.11.2024. Im Zeitraum vom 01.11.2024 bis zum 31.12.2024 fand das Kick-off-Treffen und ein Jour fixe statt. Hier wurden die zukünftigen Arbeiten im Konsortium besprochen und geplant.

4. Geplante Weiterarbeiten

Darstellung der Elemente im Nachweisverfahren und die Zusammenstellung der Randbedingungen.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine

Auftragnehmer: BGE TECHNOLOGY GmbH, Eschenstraße 55, 31224 Peine		Förderkennzeichen: 02 E 12234B	
Vorhabensbezeichnung: Methodische Grundlagen zur Bewertung der Integrität von Endlagerbehältern für potentielle Endlagerstandorten im Kristallingestein (BEnKo).			
Zuordnung zum FuE-Programm: C2.1 - Sicherheits- und Endlagerkonzepte C2.3 - Geotechnische und technische Barrieren			
Laufzeit des Vorhabens: 01.11.2024 bis 31.10.2026		Berichtszeitraum: 01.11.2024 bis 31.12.2024	
Gesamtkosten des Vorhabens: 299.858,14 EUR		Projektleiter: Ansgar Wunderlich	

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Das Vorhaben verfolgt das Ziel, die methodischen Grundlagen zur Bewertung der Integrität von Endlagerbehältern zu schaffen. Sie sollen vergleichbare und robuste Aussagen zur Integritätsbewertung unter den korrosiven Randbedingungen einer Endlagerung im Kristallingestein ermöglichen. Damit wird eine wesentliche Grundlage für die Entwicklung von Behälterkonzepten bereitgestellt. Dafür werden im Vorhaben vier Teilziele verfolgt: Zunächst soll auf Basis der in anderen Projekten festgelegten Anforderungen an Endlagerbehälter eine grundlegende Charakteristik einer Nachweismethodik dargestellt werden. Der Schwerpunkt liegt dabei auf den Aspekten der zeitabhängigen Korrosion und der mechanischen Stabilität von Endlagerbehältern. Als zweites Teilziel sollen korrosionsspezifische Kriterien an Behältermaterialien formuliert werden. Dabei soll auch ermittelt werden, welche Korrosionserscheinungen zulässig sind um die Integritätsziele nicht zu verletzen. Das dritte Teilziel ist die Erstellung einer Versuchsmatrix die als Zusammenstellung der zu erwartenden Randbedingungen in den Teilgebieten des kristallinen Wirtsgesteins und den potentiell für Endlagerbehälter möglichen Werkstoffen als Leitlinie für spätere Korrosionsuntersuchungen dienen kann. Als abschließendes Teilziel soll ein Vergleich und eine Bewertung von Modellierungsansätzen und -werkzeugen zur Ableitung der zeitabhängigen Korrosion und zur korrosionsabhängigen mechanischen Stabilität von Endlagerbehältern anhand eines generischen Testfalls durchgeführt werden.

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

- AP 1 - Nachweisverfahren zur Bewertung der Integrität nach einlagerungsbedingter Korrosion
- AP 2 - Zusammenstellung von Randbedingungen, die für die Bewertung der Korrosion von Behältermaterialien relevant sind
- AP 3 - Identifizierung von offenen Fragestellungen, die für die Bandbreite der Kristallingestein-Teilgebiete relevant sind
- AP 4 - Modelle zur Behälterintegrität
- AP 5 - Projektkoordination

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Durchführung eines Kick-Off Meetings und Absprache der Arbeiten mit dem Verbundpartner. Beginn der Arbeiten im AP-1 zur Zusammenfassung der Nachweisverfahren und im AP-2 zur Zusammenstellung der Randbedingungen. Im AP-1 sollen zunächst die bislang in Forschungsvorhaben wie dem Vorhaben Christa-II vorgeschlagenen Nachweiskonzepte zusammengefasst und auf ihre Eignung für den Sicherheitsnachweis von Endlagerbehältern überprüft werden. Im AP-2 beginnen die Arbeiten mit der Zusammenstellung der geologischen Randbedingungen für die von der BGE ausgewiesenen Teilgebiete des kristallinen Wirtsgesteins. Parallel dazu werden die weiteren im Umfeld des Behälters eingebrachten Komponenten des Endlagersystems, wie Versatz- und Verschlussmaterialien, Ausbau, Bohrlocheinbauten etc., zusammengestellt.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP-1: Weiterführung der Arbeiten zur Zusammenfassung der Nachweisverfahren

AP-2: Weiterführung der Arbeiten zur Zusammenstellung der für die Behälterkorrosion relevanten Randbedingungen unter Endlagerbedingungen

AP-3: Beginn der Arbeiten zur Identifizierung der offenen Fragestellungen bezüglich der Behälterkorrosion unter nationalen Randbedingungen und Ableitung einer Versuchsmatrix

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine

Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 12254
Vorhabensbezeichnung: DOSIS: Methodisches Vorgehen zur Entwicklung und Validierung von Modellen zur langzeitsicherheitlichen Bewertung von Endlagern für radioaktive Abfälle		
Zuordnung zu den FuE-Feldern des Förderprogramms: C3.2: Methodische Grundlagen der Nachweisführung C3.3: Werkzeuge der Sicherheitsanalysen		
Laufzeit des Vorhabens: 01.12.2024 bis 30.11.2027	Berichtszeitraum: 01.12.2024 bis 31.12.2024	
Gesamtkosten des Vorhabens: 1.070.855,00 EUR	Projektleiter: Reiche, Tatiana	

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Ziel des Vorhabens ist die Weiterentwicklung von NaTREND, einem Rechenmodul des Programmpakets RepoTREND zur Simulation von Prozessen im Nahfeld eines Endlagersystems. Der Schwerpunkt ist die Bereitstellung eines integrierten Codes zur zuverlässigen Bewertung der Langzeitsicherheit von Endlagern im Bewertungszeitraum bis zu einer Million Jahre. Dabei werden endlagerspezifische Effekte wie Gebirgskonvergenz, Temperaturabhängigkeit und Korrosion modelliert.

Zur Verbesserung von Stabilität und Effizienz wird ein gedämpftes Newton-Verfahren implementiert. Bei der Weiterentwicklung des statistischen Rahmens RepoSTAR sollen neue Verfahren zur Ungewissheits- und Sensitivitätsanalyse integriert werden, um probabilistische Bewertungen nach dem aktuellen Stand der Technik zu ermöglichen.

Das Projekt baut auf den Ergebnissen des Vorhabens RepoTREND+ (02E11466) auf und schafft eine Weiterentwicklung der Grundlagen für Modellrechnungen in aktuellen und zukünftigen Sicherheitsanalysen im Rahmen von Endlagerprojekten.

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

AP1: Erweiterung von NaTREND und Codepflege

Erweiterung von NaTREND um endlagerrelevante Effekte: Gebirgskonvergenz (AP 1.1), Temperaturabhängigkeit (AP 1.2) und Korrosion (AP 1.3); Implementierung eines gedämpften Newton-Verfahrens zur Stabilisierung (AP 1.4); Erweiterung des statistischen Rahmens RepoSTAR um neue Verfahren (AP 1.5).

Die Arbeiten umfassen: Anforderungsanalyse, Erstellung neuer Konzepte und Modelle, Entwicklung der Softwarearchitektur, Codeentwicklung und -pflege einschließlich Testen und weiteren Qualitätssicherungsmaßnahmen sowie Projektmanagement. Die Projektergebnisse werden auf Fachkonferenzen präsentiert.

AP2: Qualifizierung des Rechencodes

Qualifizierung von NaTREND durch Vergleich mit experimentellen Daten, anderen Rechenmodellen und Nachmodellierung von Anwendungsfällen aus GRS-Forschungsprojekten

AP3: Projektkoordination und Qualitätsmanagement

Organisatorische und koordinierende Tätigkeiten, Dokumentation.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1

Das Projekt befindet sich derzeit in der initialen Phase. In dieser Phase lag der Fokus auf der Planung und Organisation der bevorstehenden Arbeitspakete sowie der Festlegung der Projektstruktur.

Die folgenden Maßnahmen wurden umgesetzt:

- Ein detaillierter Projektplan wurde aufgestellt, der als Grundlage für die erfolgreiche Umsetzung der nächsten Schritte dienen soll.
- Die Verteilung der Verantwortlichkeiten und die Zuweisung von Aufgaben an die Teammitglieder wurden organisiert.
- Erste Schritte zur Sicherstellung der benötigten technischen Infrastruktur wurden eingeleitet.

AP3

Der vorliegende Bericht wurde erstellt.

4. Geplante Weiterarbeiten

Im nächsten Halbjahr soll überwiegend an AP1 gearbeitet werden, wobei der Schwerpunkt bei der Spezifikation der umzusetzenden Anforderungen und Erstellung der Konzepte liegen soll.

5. Berichte, Veröffentlichungen

–

2.2 Vorhaben Bereich D1 – D3

Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer: Technische Universität Clausthal, Adolph-Roemer-Straße 2a, 38678 Clausthal-Zellerfeld		Förderkennzeichen: 02 E 11849A
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt A		
Zuordnung zum FuE-Programm: C2.2 Endlagertechnik C3.1 Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-) Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2019 bis 31.03.2025	Berichtszeitraum: 01.07.2024 bis 31.12.2024	
Gesamtkosten des Vorhabens: 3003244,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Klaus-Jürgen Röhlig	

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

In TRANSENS soll transdisziplinär geforscht werden: Die interessierte Öffentlichkeit und andere außerakademische Akteure werden planvoll in Forschungskontexte, 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, Fachgebiet für Endlagersysteme (ELS) 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 Geomechanik und multiphysikalische Systeme (GEMS) 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 GEMS zu Fragen des Monitorings forscht.

Das IELF koordiniert gemeinsam mit dem ITAS das Verbundvorhaben sowie die Außenkommunikation.

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

Nachfolgend werden die Arbeitsinhalte für das gesamte Verbundvorhaben dargestellt. Zur Zuordnung der Arbeiten zu den Vorhabenpartnern wird auf die Vorhabenbeschreibung verwiesen. Modul SAFE 1: Analyse: Desk research; Literaturstudie zu Ungewissheiten; Zusammenstellung zu Szenarien; Zusammenstellung von Botschaften und Informationen sowie deren Darstellungen (Indikatoren, Abbildungen)

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

Modul SAFE 3: Transdisziplinäre Kommunikation und Auswertung

Modul SAFE 4: Ergebnisdarstellung von Modellrechnungen, Indikatoren, Ungewissheiten

Modul SAFE 5: Analyse des langzeitigen Systemverhaltens von Tiefenlagern

Modul SAFE 7: Lösungsorientierte Berichterstattung und Empfehlungen

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

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

numerischen TH2M-gekoppelten Simulationen; Diskursiver Dialog mit der AGBe zur Identifizierung von

Anforderungen an die Ausgestaltung von als vertrauenswürdig angesehenen Monitoringprogrammen; Rückspiegelung an außerwissenschaftliche Akteure / AGBe; Aufbau einer Plattform zur Visualisierung und Illustration von Simulationsergebnissen

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

ELS (Koordination und Kommunikation): Das zentrale Vorhaben des Halbjahrs war die Planung und Durchführung der TRANSENS-Abschlusskonferenz am 13. und 14. September. Dabei wurde mit den lokalen Gastgebern der LUH zusammengearbeitet und ein Programm aufgestellt, das die transdisziplinäre Arbeitsweise von TRANSENS in einem Dialog von Wissenschaft und Gesellschaft widergespiegelt hat. Unter reger Beteiligung der Fachöffentlichkeit und Bürger:innen konnten alle TRANSENS-Teams ihre Ergebnisse präsentieren. Über 200 Teilnehmer:innen aus Wissenschaft, Politik und Gesellschaft folgten der Einladung unter dem Motto „Ein Ding der Unmöglichkeit? – Transdisziplinäre anwendungsorientierte Grundlagenforschung zur nuklearen Entsorgung“.

Begleitend wurde ein Magazin „Project Insights 2024“ als prägnante Darstellung von TRANSENS entworfen und eine TRANSENS-eigene Podcast-Folge veröffentlicht, die die transdisziplinäre Arbeit des Gesamtprojektes einer interessierten Öffentlichkeit zugänglich macht: "Für ein sicheres Endlager: Gemeinsam Forschen mit der Öffentlichkeit". Holger Klein, der Gesprächsmoderator der WRINT-Podcasts, hat auf dem TRANSENS-Arbeitstreffen in Berlin Gespräche geführt, die in einer Kurz- und einer Langfassung veröffentlicht wurden. Die gute Resonanz darauf lässt sich an den Abrufzahlen ablesen: Der Podcast-Host gibt diese mit 22.100 (Stand 21.01.2025) an.

Insgesamt wurden fünf weitere TRANSENS-Berichte (Nr. 17-21) zur Veröffentlichung begleitet und weitere zum Review vorbereitet. Es wurden vier Newsletter versendet. Die Abonnentenzahlen konnten noch einmal etwas erhöht werden. Insbesondere die TRANSENS-Berichte werden zunehmend auch über den Newsletter aufgerufen. Die Arbeiten am Abschlussbericht des Gesamtprojektes wurden intensiv weiterverfolgt. Aufgaben wie das Betreuen der TRANSENS-Hotline, der Meetings der I-TD, das Pflegen der Homepage sowie der Cloud-Zugänge und Veröffentlichungsdatenbank sowie die Koordinationsprechstunde wurden kontinuierlich fortgeführt.

Gemeinsame Arbeiten: Die Aufarbeitung der Ergebnisse des SAFE-Abschlussworkshops mit Expert:innen erfolgte im TRANSENS-Bericht „Optimierung des Safety Case – Argumente aus Erfahrung“. Die Ergebnisse gingen wesentlich in die Abschlussberichterstattung des TAP SAFE (s. u.) ein. Ein Promotionsprojekt am Fachgebiet GEMS (Zweitbegutachtung durch Fachgebiet ELS) wurde abgeschlossen. Ein Artikel im „Forschungsjournal soziale Bewegungen“ wurde mit Kollegen der TU Berlin und CAU Kiel veröffentlicht.

ELS (TAP SAFE): Drei Artikel, davon zwei in einem Online-Fachjournal (peer-reviewed, open access) sowie ein Beitrag zum u. a. durch ELS-Mitarbeitende als Sammelband herausgegebenen TRANSENS-Bericht der Bearbeiter:innen, wurden veröffentlicht. Im Rahmen der TRANSENS-Abschlusskonferenz wurden drei Poster vorgestellt sowie drei Vorträge gehalten. Der SAFE-Abschlussbericht wurde reviewed und befindet sich in der finalen Überarbeitung. Der SAFE-

Beitrag zum TRANSENS-Abschlussbericht wurde finalisiert. Auf der Konferenz „Safety Case Symposium 2024“ wurde am 09.10.2024 ein Vortrag über die Arbeit des TAP SAFE gehalten.

GEMS (TAP SAFE, TAP TRUST): Multiphysikalische Simulationen für die Wirtsgesteinsformation Tonsteingebirge wurden fortgeführt. Zudem wurden einige ergänzende multiphysikalische Simulationen für die Wirtsgesteinsformation Salinargebirge durchgeführt. Des Weiteren wurde an der Ergebnisdokumentation im Hinblick auf den Abschlussbericht gearbeitet und an der TRANSENS-Abschlussveranstaltung mitgewirkt im Rahmen von drei Vorträgen und einem Marktstand des GEMS.

TAP TRUST-spezifisch wurde im Rahmen der kostenneutralen Laufzeitverlängerung ein Workshop mit Studierenden der Vorlesung „Applied Rock Mechanics“ durchgeführt, um mit ihnen die möglicherweise resultierenden Trade-Offs bezüglich Vertrauensaufbau durch ein 2-Sohlen-Endlagerbergwerk mit Anordnung einer zusätzlichen Überfahrungssohle in Verbindung mit Monitoringbohrlöchern zu diskutieren.

risicare: Zentral war die Mitarbeit am Abschlussbericht von TRANSENS und am Abschlussbericht des TAP SAFE. Zwei eigene TRANSENS-Berichte wurden veröffentlicht. Zudem wurden Reviews von drei TRANSENS-Berichten und zwei wissenschaftlichen Publikationen durchgeführt. Im Rahmen der Abschlusskonferenz in Hannover hat risicare Ergebnisse präsentiert und sich weiter an der Durchführung beteiligt. Daneben hat Anne Eckhardt weiterhin in Sprecherteam und I-TD mitgewirkt.

4. Geplante Weiterarbeiten

ELS (Koordination und Kommunikation): Das Projekt wird zum Ende der kostenneutralen Verlängerung begleitet. Weitere TRANSENS-Berichte sind auf dem Weg zur Veröffentlichung. Die Abschlussdokumentation mit besonderem Fokus auf dem Abschlussbericht wird erstellt und bereitgestellt.

ELS (TAP SAFE, EDU): Ein SAFE-Abschlussbericht wird erstellt und veröffentlicht. Beiträge dazu sowie zum TRANSENS-Abschlussbericht, welche als TRANSENS-Berichte erscheinen werden, sind ebenso in Vorbereitung wie der Abschluss zweier Dissertationen.

GEMS (TAP SAFE, TAP TRUST, EDU): Zukünftig sollen im TAP SAFE noch weitere numerische Simulationen vornehmlich für die Wirtsgesteinsformation Tonsteingebirge, bei Bedarf aber auch für die Wirtsgesteinsformation Salinargebirge durchgeführt werden. Die Ergebnisse dieser Simulationen werden in den Abschlussbericht eingearbeitet. Im TAP TRUST soll mit der Durchführung einer numerischen Simulation am Globalmodell für die Wirtsgesteinsformation Salinargebirge begonnen werden. Diese Simulation kann aufgrund der benötigten Rechenzeiten im Rahmen der verbleibenden Projektlaufzeit nicht mehr für einen Monitoringzeitraum von mehreren Jahrtausenden durchgeführt werden, aber möglicherweise noch für einige Jahrhunderte.

risicare: Es ist weitere, kontinuierliche Mitarbeit am Abschlussbericht und zu laufenden Aufgaben des Sprecherteams geplant.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Ebeling, M. et al. (2024): Planung und Durchführung transdisziplinärer Workshops zur Optimierung des Safety Case, in: Transdisziplinäre Ansätze in der nuklearen Entsorgungsforschung. Erfahrungen und Reflexionen aus dem Projekt TRANSENS, Nr. 17, TRANSENS-Bericht, Clausthal-Zellerfeld 2024, S. 80-98, DOI: 10.21268/20240529-3, <https://doi.org/10.21268/20240529-3>

Ebeling, M./ Heiermann, M./ Röhlig, K.-J. (2024): Opportunities for the further development of the Safety Case for deep geological repositories by transdisciplinary research – FEP catalogs and scenario development, in: Front. Nucl. Eng., Vol. 3 - 2024, Nr. 1416508 2024, DOI: <https://doi.org/10.3389/fnuen.2024.1416508>, <https://www.frontiersin.org/journals/nuclear-engineering/articles/10.3389/fnuen.2024.1416508/full>

Eckhardt, A. (2024): Das Endlager im Raum unter Tage. Die Endlagerung hochradioaktiver Abfälle im Kontext der Raumplanung im Untergrund, TRANSENS-Bericht 2024, ISSN: 2747-4186, DOI: 10.21268/20240812-0

- Eckhardt, A./ Heiermann, M./ Röhlig, K.-J. (2024): Optimierung des Safety Case – Argumente aus Erfahrung: Ergebnisse der transdisziplinären Formate mit Praxisakteur:innen im TAP SAFE, TRANSENS-Bericht 2024, ISSN: 2747-4186, DOI: <https://doi.org/10.21268/20240702-0>
- Heiermann, M. (Hg.) et al. (2024): Transdisziplinäre Ansätze in der nuklearen Entsorgungsforschung. Erfahrungen und Reflexionen aus dem Projekt TRANSENS, TRANSENS-Bericht, Clausthal-Zellerfeld 2024, ISSN: 2747-4186, DOI: 10.21268/20240529-1
- Heiermann, M./ Olszok, V. (2024): Transdisciplinary research on the safety case for nuclear waste repositories with a special focus on uncertainties and indicators, in: Frontiers in Nuclear Engineering, Vol. 3 2024, DOI: 10.3389/fnuen.2024.1414964, <https://www.frontiersin.org/journals/nuclear-engineering/articles/10.3389/fnuen.2024.1414964/full>
- Othmer, J. A. (2024): Beitrag zur Entwicklung einer soziotechnisch basierten Monitoringkonzeption für ein generisches Tiefen-/Endlager im Salinargebirge unter Anwendung eines transdisziplinären Forschungsansatzes, TU Clausthal, Clausthal-Zellerfeld 2024
- Ott K., Röhlig K.-J., Präger F., von Hirschhausen C. (2024) Für mehr Tempo in der Endlagerung hochradioaktiver Abfälle. FORSCHUNGSJOURNAL SOZIALE BEWEGUNGEN 37. JG. Heft 4 | 2024, <https://forschungsjournal.de/fjsb-plus/ott-roehlig-praeger-von-hirschhausen-fuer-mehr-tempo-in-der-endlagerung-hochradioaktiver-abfaelle/>

Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer: Christian-Albrechts-Universität zu Kiel, Philosophisches Seminar		Förderkennzeichen: 02 E 11849B
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt B		
Zuordnung zum FuE-Programm: D2.1 Long-Term Governance		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2019 bis 31.03.2025	Berichtszeitraum: 01.07.2024 bis 31.12.2024	
Gesamtkosten des Vorhabens: 1.375.945,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Konrad Ott	

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

In TRANSENS soll transdisziplinär geforscht werden: Die interessierte Öffentlichkeit und andere außerakademische Akteure werden planvoll in Forschungskontexte, konkret in Transdisziplinäre Arbeitspakete (TAP) eingebunden.

Die Möglichkeiten transdisziplinärer Forschung in der nuklearen Entsorgung werden im Verbund systematisch reflektiert (Transdisziplinaritätsforschung). Spezielle Aktivitäten zielen auf Nachwuchsförderung und Kompetenzerhalt.

Die Arbeitsgruppe an der CAU ist Projektpartner im TAP DIPRO.

Dialog und Diskurs sind Schlüssel zur Verständigung. Wie muss der langwierige Prozess gestaltet werden, um dafür gute Bedingungen auf dem Entsorgungspfad zu schaffen? Das ist Gegenstand der transdisziplinären Forschung im TAP DIPRO.

Am Philosophischen Seminar und am Institut für Informatik werden in interdisziplinärer Kooperation (i) Narrative des Entsorgungsdiskurses analysiert, (ii) eine Theorie von "wicked communication" entwickelt, (iii) gesellschaftliche Steuerungsmedien bewertet, (iv) Nachvollziehbarkeit und Transparenz des Entsorgungsprozesses wissenschaftstheoretisch untersucht und über Visualisierungen für den transdisziplinären Forschungsmodus aufbereitet, unterstützend wird hierzu (v) eine Multimediawerkstatt aufgebaut.

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

Das Arbeitsprogramm in DIPRO zeichnet sich durch eine disziplinäre Aufbereitung von Sachverhalten, die interdisziplinäre Verständigung darüber und im Kern der Forschungsarbeit durch Workshops aus, bei denen verschiedene transdisziplinäre Formate entsprechend der Themensetzung zur Anwendung kommen werden. Im ersten Projektjahr soll zudem eine eigens für DIPRO gebildete Begleitgruppe aus wenigen Laien eingesetzt werden, die die Gestaltung und die Inhalte der Workshops über die Projektlaufzeit hin reflektiert. Die zentralen Forschungsfragen, die DIPRO an die Begleitgruppe und die Workshops stellt, sind:

1. Welche normativen Voraussetzungen, praktischen Anforderungen und gesellschaftlichen Erwartungen gilt es, für ein gerechtes und resilientes Verfahren und den jeweiligen Entsorgungspfad zu berücksichtigen?
2. Welche gesellschaftlichen Erwartungen und Ansprüche an eine zielführende Endlager-Governance und Öffentlichkeitsbeteiligung lassen sich identifizieren und wie können diese in politische Maßnahmen einfließen?
3. Wie ist das Standortauswahlverfahren unter Bedingungen von „wicked problems“ und „wicked communication“ im Sinne von „good governance“ auszugestalten?

Neben anwendungsorientierter Grundlagenforschung (desk-research, Experimente) bestehen die wesentlichen Arbeitspunkte des Kieler Teilprojektes in der Entwicklung, Durchführung und Evaluation transdisziplinärer Formate (Workshops, Multimediawerkstatt, Informationsdesigns). Inhaltliche Schwerpunkte liegen auf Verfahrensgerechtigkeit, Kommunikation und Standortverantwortung.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- Fortsetzung Aufarbeitung und Reflexion des Forschungsstandes inter- und transdisziplinärer Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle. Kontinuierliche Arbeit mit der DIPRO-Begleitgruppe (DBG): monatliche Teeküche; Planung des Beitrags der DBG zur Abschlussveranstaltung; Nachbesprechung der Abschlussveranstaltung
- Teilnahme an regelmäßigen TD-Treffen mit anderen TAPs.
- Fertigstellung des DIPRO-Berichts zum Workshop C in Kiel (derzeit im internen Review-Verfahren)
- Erstellen von verschiedenen Beiträgen zur Dokumentation und Auswertung von DIPRO-Workshop F in Hannover
- Mitherausgabe des Sammelbands *Kooperative Gerechtigkeit – blühende Landschaft?* mit den DIPRO-Teams am KIT und an der FU
- Überarbeitung von zwei Beiträgen im Sammelband *Kooperative Gerechtigkeit – blühende Landschaft?*
 - Kompensationen in der transdisziplinären Endlagerforschung
 - Kompensationen in der Standortvereinbarung
- Beteiligung an der TRANSENS-Abschlussveranstaltung in Hannover (13.-14.09.2024)
 - Vortrag zur Dialektik der Ethik in der Endlagersuche
 - Vortrag zum Umgang mit Ungewissheiten
 - Marktstand zur Visualisierung von endlagerrelevanten Zeiträumen durch Virtual Reality
- Vorstellung von Projektergebnissen:
 - Vortrag zur intergenerationellen Gerechtigkeit bei der Entsorgung hochradioaktiver Abfälle, Tagung für praktische Philosophie am 19.09.2024 in Passau
 - Vortrag zur intergenerationellen Gerechtigkeit bei der Entsorgung hochradioaktiver Abfälle, Forum Zwischenlagerung am 29.10.2024 in Berlin
- Vortrag *Philosophische und ethische Reflexionen zur Entsorgung* von Christian Loos im Rahmen der TRANSENS Ringvorlesung am 01.07.2024 in Hannover. Mitorganisation eines Workshops zur intergenerationellen Gerechtigkeit bei der Zwischenlagerung (Format Zukunftswerkstatt) mit den DIPRO-Teams an der FU und TU

4. Geplante Weiterarbeiten

- Veröffentlichungen zu den Themen intergenerationelle Gerechtigkeit und vertrackte Kommunikation (??)
- Auswertung der Workshopreihe E
- Fertigstellung der Abschlussdokumentation der Projektarbeiten. Finalisierung eines Sammelbandes zur Ethik von Institutionen und Organisationen

5. Berichte, Veröffentlichungen

- R. Sierra (2024): Transdisziplinarität in der Entsorgungsforschung: Erfahrungen aus dem Projekt TRANSENS. In: M. Heiermann et al (Hg.), *Transdisziplinäre Ansätze in der nuklearen Entsorgungsforschung. Erfahrungen und Reflexionen aus dem Projekt TRANSENS. TRANSENS-Bericht 17*, S. 12-31.
- R. Sierra (2024): Zukunftsbezug in den Diskursen zur Entsorgung radioaktiver Abfälle in Deutschland und Argentinien (im Spanischen). In: R. Bolte et al (Hg.), *Existencias contaminadas. Escenarios ecosistémicos del Antropoceno en América Latina*. Boston: De Gruyter, S. 155-175.
- Ott, K., Christian von Hirschhausen, Klaus-J. Röhlig (2024): Es droht ein schleichender Verzehr der Sicherheit. In: *Franfurter Allgemeine*. Gastkommentar vom 15.08.2024, <https://www.faz.net/aktuell/wissen/physik-mehr/atommuellendlager-es-droht-ein-schleichender-verzehr-der-sicherheit-19915362.html>.

- Ott, K. (2024): Ad Calendas Graecas? Ethische und politische Bemerkungen zum offiziellen "Abschied von 2031" bei der Endlagersuche, in: Eckhardt, A., Becker, F., Mintzloff, V., Scheer, D., und Seidl, R. (Hg.): *entscheidung in der Zukunft*. Wiesbaden: Springer Fachmedien Wiesbaden (energiepolitik und Klimaschutz. Energy Policy and Climate Protection), S. 53-73. https://doi.org/10.1007/978-3-658-42698-9_4
- Ott, K. (2024): Vom „Framing“ zu Problembeschreibung, Situationsdeutung und Kontextualisierungen in der Endlagersuche, in: Quante et al. (Hrsg.), *Energieverantwortung. Beiträge zu ethischen Grundlagen und Zuständigkeiten in inter- und transdisziplinärer Perspektive*, Berlin 2024, S. 31-60.
- Ott, K., Klaus-Jürgen Röhlig, Fabian Präger und Christian von Hirschhausen: Für mehr Tempo in der Endlagerung hochradioaktiver Abfälle. *FORSCHUNGSJOURNAL SOZIALE BEWEGUNGEN* 37. JG. Heft 4 2024, https://forschungsjournal.de/fjsb/wp-content/uploads/fjsb-plus_2024-4_ott.pdf.
- Ott, Konrad (im Erscheinen). Kompensation in der transdisziplinären Endlagerforschung. In: U. Smeddinck, R. Sierra, L. Schwarz (Hg.), *Kooperative Gerechtigkeit – blühende Landschaft? Die Standortvereinbarung nach § 10 Abs. 4 S. 3 Standortauswahlgesetz: Interdisziplinäre Beiträge*. Berliner Wissenschafts-Verlag, S. 71-92.

Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer: Freie Universität Berlin, FB Politik und Sozialwissenschaften		Förderkennzeichen: 02 E 11849C
Vorhabensbezeichnung: Verbundvorhaben: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland – TRANSENS, Teilprojekt C		
Zuordnung zum FuE-Programm: D2.1 Long-Term Governance		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2019 bis 31.03.2025		Berichtszeitraum: 01.07.2024 bis 31.12.2024
Gesamtkosten des Vorhabens: 991.894,00 EUR		Projektleiter: PD Dr. A. Brunnengräber

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

In TRANSENS wird transdisziplinär geforscht: Die interessierte Öffentlichkeit und andere außerakademische Akteure werden gezielt in Forschungskontexte, konkret in Transdisziplinäre Arbeitspakete (TAP), eingebunden. Die Analyse der transdisziplinären Forschungsaktivitäten soll Hinweise liefern, wie die Kommunikation zwischen Wissenschaft und den Beteiligten des Standortauswahlverfahrens sowie der Bevölkerung verbessert werden kann. Spezifische Aktivitäten zielen auf Aus- und Weiterbildung sowie auf die Nachwuchsförderung und den Kompetenzerhalt.

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

Die FU Berlin ist zentral am TAP DIPRO beteiligt: Dialoge und Prozessgestaltung in Wechselwirkung von Recht, Gerechtigkeit und Governance. Untersucht werden in interdisziplinärer Kooperation und mittels transdisziplinärer Formate: (1) Narrative und Frames der Entsorgungsdiskurse / „wicked communication“, (2) Charakteristika von „wicked problems“ aus dialogischer Perspektive, (3) Wissensbestände und vertrauensbildende Wissensaufbereitung und –vermittlung sowie (4) Formen und Medien der Regulierung. Die FU Berlin ist zudem in die Begleitforschung zu Transdisziplinarität eingebunden (BegleitTeam.TD). Hier erfolgt die formative und reflektierende Begleitung der TAP-Forschenden und der am Forschungsprozess beteiligten Öffentlichkeit wie der außerakademischen Akteure.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- 1 Buchveröffentlichung, 2 Fachveröffentlichungen in wissenschaftlichen Zeitschriften, 4 Fachvorträge, 1 Posterpräsentation
- Überarbeitung und Veröffentlichung der Dissertation von Lucas Schwarz: „Die Landkarte der Gerechtigkeit. Eine integrative Perspektive auf die nukleare Entsorgung in Deutschland“
- Vorbereitung, Teilnahme und Nachbereitung an der TRANSENS-Abschlusskonferenz im September in Hannover
- Begutachtung der MA-Arbeit von Jan Sieveking: „KENFO as a Case of State Asset Financialisation in Germany“
- Einreichung eines Fachartikels in Renewable and Sustainable Energy Reviews
- Gutachtertätigkeiten für Leviathan - Berliner Zeitschrift für Sozialwissenschaft, GAIA (Ecological Perspectives for Science and Society), Global Governance (A Review of Multilateralism and International Organizations)

DIPRO:

- Beitragsentwurf zum Thema „Die Beschleunigungsdebatte im Standortauswahlverfahren“
- vergleichende Analyse der deutschen und schweizerischen Finanzierung der Entsorgung und Verschriftlichung der Ergebnisse
- Teilnahme beim 3. Forum Endlagersuche in Würzburg (online), teilnehmende Beobachtung
- Synthese: 3 Jahre Öffentlichkeitsbeteiligung bei der Standortsuche für ein Endlager (2020 – 2023)
- Erhebung und Beitrag für Abschlussbericht zum Thema „Wirkungen auf das Standortauswahlverfahren“

BegleitTeam.TD:

- Synthese der transdisziplinären Forschungserkenntnisse

4. Geplante Weiterarbeiten

- Mitarbeit am Abschlussberichts von TRANSENS
- Fortsetzung der Betreuung der Dissertation von Dörte Themann
- Arbeiten zu den Kernproblemen auf dem Entsorgungspfad
- Arbeiten zur Beschleunigungsdebatte im Standortauswahlverfahren

5. Berichte, Veröffentlichungen, Vorträge

VORTRÄGE:

- Bei der Abschlusskonferenz von TRANSENS in Hannover:
 - 1) Brunnengräber, Achim: Wicked financing – der Staatsfonds KENFO
 - 2) Themann, Dörte: Commoning im Umgang mit (hoch)radioaktiven Abfällen
 - 3) Denk, Albert: Die Öffentlichkeitsbeteiligung im Standortauswahlverfahren (und Posterpräsentation / im Ausstellungsbereich)
 - 4) Lucas Schwarz: Die Landkarte der Gerechtigkeit

VERÖFFENTLICHUNGEN:

- Brunnengräber, Achim (2024): Fondsmodelle für den hochradioaktiven Atommüll, In: GWP – Gesellschaft. Wirtschaft. Politik, 4/2024, 483-495, <https://doi.org/10.3224/gwp.v73i4.09>
- Denk, Albert; Brunnengräber, Achim (2024): Instrumentalisierte Öffentlichkeit. In: Forschungsjournal Soziale Bewegungen Plus. 37 (1). Online: <https://forschungsjournal.de/fjsb-plus/denk-brunnengraeber-instrumentalisierte-oeffentlichkeit/>
- Denk, Albert (2024): Exclusive Public. An Analysis of Public Participation in the Site Selection Procedure for a Repository for Nuclear Waste. In: Frontiers in Political Science, Comparative Governance (6), <https://doi.org/10.3389/fpos.2024.1271062>
- Schwarz, Lucas (2024): Die Landkarte der Gerechtigkeit. Eine integrative Perspektive auf die nukleare Entsorgung in Deutschland, <https://cu villier.de/de/shop/publications/9074-die-landkarte-der-gerechtigkeit>

Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer: Karlsruher Institut für Technologie (Großforschungsaufgabe)		Förderkennzeichen: 02 E 11849D
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt D		
Zuordnung zum FuE-Programm: D2.1 Long-Term Governance		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2019 bis 01.03.2025	Berichtszeitraum: 01.07.2024 bis 31.12.2024	
Gesamtkosten des Vorhabens: 550.967,50 EUR	Projektleiter: Volker Metz, Ph.D.	

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

In TRANSENS soll transdisziplinär zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland geforscht werden. Die interessierte Öffentlichkeit und andere außerakademische Akteure werden planvoll in Forschungskontexte, konkret in Transdisziplinäre Arbeitspakete (TAP) eingebunden. Die Möglichkeiten transdisziplinärer Forschung in der nuklearen Entsorgung werden im Verbund systematisch reflektiert (Transdisziplinaritätsforschung). Spezielle Aktivitäten zielen auf Nachwuchsförderung und Kompetenzerhalt.

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

Die Schwerpunkte der Arbeiten des KIT-INE liegen im Modul „Pfadabhängigkeit als Risiko und Herausforderung“ des TAP „HANDlungsfähigkeit und Flexibilität in einem reversiblen Verfahren“ (HAFF).

Unsere Arbeiten gliedern sich in das

AP1: „Sicherung von Handlungsfähigkeit im Standortauswahlverfahren und der Betriebsphase“ und das

AP2: „Technische und verfahrenstechnische Komponenten von Entsorgungspfaden und deren Nebenfolgen“.

In diesem Modul werden von uns Fragestellungen überprüft, die im Kontext des Standortauswahlverfahrens für Wärme entwickelnde Abfälle hinsichtlich Reflexivität und Reversibilität des Verfahrens von besonderer Bedeutung sind. Hierzu werden Arbeiten zur Zwischenlagerung und Entwicklung von Tiefenlagersystemen unter Berücksichtigung der technischen Barrieren und deren Implikationen durchgeführt, wobei insbesondere die Verknüpfung von Infrastruktur-, Strahlenschutz- und Betriebssicherheitsaspekten verschiedener Komponenten des Entsorgungspfads analysiert werden. Im weiteren Verlauf des Verbundvorhabens soll gemeinsam mit Partnern des TAP HAFF Haltepunkte definiert werden, an denen der jeweilige Sicherheitsstatus eines Entsorgungspfads überprüft und ein Dialog mit der Bevölkerung angestrebt wird.

Zusammenarbeit im Forschungsverbund TRANSENS: Das Arbeitspaket 2 „Technische und verfahrenstechnische Komponenten von Entsorgungspfaden und deren Nebenfolgen“ wird durch einen Mitarbeiter des KIT-INE geleitet.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im Berichtszeitraum nahmen F. Becker und V. Metz regelmäßig an den Online- bzw. Präsenztreffen des TAP-HAFF teil. Darüber hinaus beteiligte sich F. Becker an den Besprechungen der EL-Nano-Lesegruppe (KIT-ITAS), der TD-Interessierten (ETH Zürich) und der TRANSENS-Bearbeiterinnen und Bearbeiter.

F. Becker und V. Metz stellten ihre Arbeitsergebnisse mit einem Poster, drei Vorträgen und einem Workshop auf der TRANSENS-Abschlusskonferenz am 13. und 14. September 2024 in Hannover vor (siehe Abschnitt „Berichte, Veröffentlichungen“).

Erfahrungen aus dem gegenseitigen Austausch zwischen Bevölkerung und Forschenden, die F. Becker und V. Metz während der fünfjährigen Mitarbeit im TRANSENS-Projekt gewonnen hatten, wurden von uns im TRANSENS-Magazin zum Abschluss des Projekts zusammengefasst (siehe Abschnitt „Berichte, Veröffentlichungen“).

Das Manuskript „*Aspekte im Hinblick auf eine Neugenehmigung von HAA-Zwischenlagern nach 40 Jahren Betriebszeit*“ des Teams bestehend aus J.M. Neles, F. Becker, T. Hassel, T. Leusmann, V. Metz und I. Scharf wurde im Spätsommer 2024 eingereicht. Anschließend folgte ein Begutachtungsverfahren durch das TRANSENS Sprecherteam / I-TD und die Revision des Berichts. Dieser wurde allerdings erst am 27. Januar 2025 (also nach Ende des Berichtszeitraum 1.7.2024 bis 31.12.2024) als TRANSENS-Bericht veröffentlicht.

4. Geplante Weiterarbeiten

Gemäß dem Änderungsbescheid vom 4. November 2024 wurde für unser Teilprojekt 02 E 11849D eine kostenneutrale Verlängerung bewilligt, allerdings im Haushaltsjahr 2025 keinerlei Geld zur Verfügung gestellt. Dennoch planen wir begonnene Veröffentlichungen weiterzuverfolgen, wie z.B. das Manuskript mit dem Arbeitstitel „*Betrachtungen zur Option der direkten Endlagerung von in Deutschland vorhandenen Transport- und Zwischenlagerbehältern der CASTOR-Familie in tiefen geologischen Formationen*“ das mit T. Hassel (IW LUH) fertiggestellt und zur Publikation in der Zeitschrift „*atw – International Journal for Nuclear Power*“ eingereicht werden soll.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Beiträge zur TRANSENS Abschlusskonferenz, 13. und 14. September 2024, Hannover:

- Erfahrungen aus dem gegenseitigen Austausch zwischen Bevölkerung und Forschenden, Volker Metz und Frank Becker, Project Insights 2024, Magazin zum Abschluss des Projekts 2024, Seiten 6 und 7, https://www.transens.de/fileadmin/Transens/TRANSENS_Magazin_web.pdf (letzter Zugang 13 Januar 2025)
- Ungewissheiten und Narrative im Kontext der Entsorgung hochradioaktiver Abfälle – eine schwierige Beziehung? Volker Metz & Frank Becker, Poster, Vortrag und Workshop
- Betrachtungen zur Option der direkten Endlagerung, von in Deutschland vorhandenen Transport- und Zwischenlagerbehältern der CASTOR-Familie, in tiefen geologischen Formationen, Volker Metz INE KIT & Thomas Hassel IW LUH, Vortrag und Workshop
- Entscheidungen in die weite Zukunft – Umgang mit Ungewissheiten, Frank Becker, Anne Eckhardt, Klaus-Jürgen Röhlig, Christopher Schäfer, Roman Seidl & Rosa Sierra, Moderation: Cord Drögemüller, Vortrag

Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer: Karlsruher Institut für Technologie (Großforschungsaufgabe) Institut für Technikfolgenabschätzung und Systemanalyse		Förderkennzeichen: 02 E 11849E
Vorhabensbezeichnung: Verbundvorhaben: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt E		
Zuordnung zum FuE-Programm: D2.1 Long-Term Governance D2.3 Multi-kriterielle Entscheidungsprozesse		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2019 bis 31.03.2025		Berichtszeitraum: 01.07.2024 bis 31.12.2024
Gesamtkosten des Vorhabens: 2.720.831,11 EUR		Projektleiter: apl. Prof. Dr. Ulrich Smeddinck

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

In TRANSENS soll transdisziplinär zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland geforscht werden. Die interessierte Öffentlichkeit und andere außerakademische Akteure werden planvoll in Forschungskontexte, konkret in Transdisziplinäre Arbeitspakete (TAP) eingebunden. Die Möglichkeiten transdisziplinärer Forschung in der nuklearen Entsorgung werden im Verbund systematisch reflektiert (Transdisziplinaritätsforschung). Spezielle Aktivitäten zielen auf Nachwuchsförderung und Kompetenzerhalt.

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

Die ITAS-Schwerpunkte liegen im TAP HAFF und im TAP DIPRO. 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 Ergebnisse des Design-Thinking-Workshops „Nukleare Entsorgung – mögliche Wege, richtungsweisende Entscheidungen, zukünftige Herausforderungen“ (2023) wurden in zwei Veröffentlichungen dokumentiert. Erstens erschien ein Beitrag im Sammelband „*Transdisziplinäre Ansätze in der nuklearen Entsorgungsforschung: Erfahrungen und Reflexionen aus dem Projekt TRANSENS*“ (Hrsg. Heiermann, M.; Drögemüller, C.; Kogiomtjidis, A.; Seidl, R.), in dem Elske Bechthold und Stefanie Enderle unter dem Titel „*Hands on! Mit kollaborativem Erarbeiten von Lösungsideen zu neuen Räumen der Zusammenarbeit – die Arbeitsweise des Design Thinking*“ den spezifischen Mehrwert kreativer Kollaborationsmethoden herausstellen. Zweitens wurde ein umfassender Forschungsbericht vorgelegt (Bechthold, Elske, und Enderle, Stefanie (2024): *Kollaboratives Vorgehen von Praxisakteuren der nuklearen Entsorgung. Zur Handlungsfähigkeit im Standortauswahlverfahren. Karlsruhe. TRANSENS-Bericht-22*), der die gewonnenen Erkenntnisse vertieft analysiert.

Im Rahmen der Transens-Abschlusskonferenz standen die zentralen Ergebnisse des TAP HAFF im Fokus einer vom ITAS (Moderation: Dirk Scheer) organisierten Session am Wissenschaftstag. Dort wurden die Ergebnisse sowohl in Vorträgen und einer Podiumsdiskussion als auch in Postern vorgestellt. Im Zuge einer Poster-Ausstellung wurden verschiedene Facetten eines *lernenden und partizipativen Standortauswahlverfahrens* diskutiert. Wichtige Themen waren dabei:

- Problemlösefähigkeit stärken – Handlungsfähigkeit und Flexibilität gestalten!
- Lernen – eine Aufgabe für alle: Handlungsfähigkeit und Flexibilität gestalten!
- Haltepunkte im Verfahren: Handlungsfähigkeit und Flexibilität gestalten!

Am Bürger:innen-Tag der Abschlusskonferenz hatten interessierte Bürger:innen die Gelegenheit, mit dem ITAS-Team über Partizipation, Gerechtigkeitsfragen und das Standortauswahlverfahren zu diskutieren. Im Mittelpunkt stand dabei insbesondere die Frage, unter welchen Bedingungen Bürger:innen bereit wären, sich bei einer möglichen Betroffenheit ihres Wohnortes an Beteiligungsprozessen zu beteiligen.

Darüber hinaus wurden die Beratungsaktivitäten zum Thema „*TA und Governance im selbstlernenden Verfahren*“ weiter vertieft. Die Konzeption von *dialogischen Formaten*, basierend auf dem Anspruch eines „*lernenden Verfahrens*“, wurde gemeinsam mit relevanten Akteuren des Standortauswahlverfahrens ausgearbeitet. Für das Jahr 2025 ist die Durchführung mehrerer Workshops geplant, die von ITAS wissenschaftlich begleitet und evaluiert werden sollen.

TAP DIPRO:

Für die TRANSENS-Abschlussveranstaltung für die Fach- und sonstige Öffentlichkeit wurde die Vorstellung der DIPRO-Ergebnisse koordiniert sowie ein Gesprächsangebot zum Lernenden Verfahren für Bürger:innen realisiert.

Für den Sammelband zur Standortvereinbarung (Smeddinck, Sierra, Schwarz (Hg.), „*Kooperative Gerechtigkeit – blühende Landschaft?*“) wurde nach mehreren Durchgängen der Druckfahnen die Druckgenehmigung erteilt.

Für die Kommentierung des Standortauswahlgesetz, 2. Aufl., liegen nun alle Texte vor. Daraus wird zur Zeit eine Geamtdatei gebildet, die formal vereinheitlicht wird.

TAP EDU: Fortführung des ITAS-Textseminars zu einschlägiger Forschungsliteratur, in dem sowohl transdisziplinäre Themen aufgegriffen als auch durch interdisziplinäres Vorgehen neue Wissensbestände für HAFF und DIPRO erschlossen werden. Außerdem wurde Workshop zum Thema „*Verlängerte Zwischenlagerung – Herausforderung für Recht und Vertrauen*“, BGZ-Forum „*Zwischenlagerung - next gen*“ am 29.10.2024 in Berlin gestaltet und moderiert.

4. Geplante Weiterarbeiten

TAP HAFF:

Mitwirkung am Bericht „Ansatz einer raumsensiblen Long-term Governance der Entsorgung hochradioaktiver Abfälle“ (Melanie Mbah, Sophie Kuppler, Bettina Brohmann) Veröffentlichung Anfang 2025

Vorstellung und Diskussion zentraler Ergebnisse auf einschlägigen wissenschaftlichen Tagungen und in Öffentlichkeitsbeteiligungsformaten um die Ergebnisse weiter fachlich zu vertiefen und weiterzuentwickeln.

TAP DIPRO:

Die Arbeiten am Kommentar sind bis zur Versendungsreife an den Verlag fortzuführen. Die DIPRO-Berichte D und F müssen noch abschließend fertiggestellt und TRANSENS-intern reviewt werden, um als TRANSENS-Berichte veröffentlicht zu werden.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Bechthold, E.; Enderle, S.: Kollaboratives Vorgehen von Praxisakteuren der nuklearen Entsorgung. Zur Handlungsfähigkeit im Standortauswahlverfahren. Karlsruhe 2024. TRANSENS-Bericht-22

Bechthold, E.; Enderle, S.: Hands on! Mit kollaborativem Erarbeiten von Lösungsideen zu neuen Räumen der Zusammenarbeit : die Arbeitsweise des Design Thinking. Transdisziplinäre Ansätze in der nuklearen Entsorgungsforschung : Erfahrungen und Reflexionen aus dem Projekt TRANSENS, 2024 (17), 99–116. doi:10.21268/20240529-4

6. Vorträge, Conference Panel

Bechthold, E.; Enderle, S.; Kuppler, S.: Lernen – eine Aufgabe für alle : Handlungsfähigkeit und Flexibilität gestalten! 2024, September 13. Abschlusskonferenz : "Ein Ding der Unmöglichkeit? - Transdisziplinäre anwendungsorientierte Grundlagenforschung zur nuklearen Entsorgung" (TRANSENS 2024), Hannover, Deutschland, 13.–14. September 2024

Enderle, S.; Bechthold, E. (2024). Kollaborative Beziehungen - Basis für ein gelingendes Verfahren. Abschlusskonferenz : "Ein Ding der Unmöglichkeit? - Transdisziplinäre anwendungsorientierte Grundlagenforschung zur nuklearen Entsorgung" (TRANSENS 2024), Hannover, Deutschland, 13.–14. September 2024.

Gondolf, J.; Enderle, S.; Kuppler, S.: Vielfältige Beteiligungsverhältnisse - Eine konzeptionelle Analyse der „Stakeholder“ in großen Infrastrukturprojekten 2024. 11. Konferenz des Netzwerks Technikfolgenabschätzung "Politikberatungskompetenzen heute" (NTA 2024), Berlin, Deutschland, 18.–20. November 2024

Gondolf, J.; Enderle, S.; Kuppler, S.: Contested Engagement: A Conceptual Analysis of "the Stakeholders" in Large Infrastructure Projects 2024. Forum on Philosophy, Engineering, and Technology (fPET 2024), Karlsruhe, Deutschland, 17.–19. September 2024

Kuppler, S.:

Ansätze einer zukunftsfähigen Forschungslandschaft. Wünsche einer Wissenschaftlerin. Kurzimpuls im Rahmen der Veranstaltung „Wie erreichen wir Transparenz in der Forschungslandschaft? Wie kann die Öffentlichkeit Einfluss nehmen?“ als Teil der Forumstage des 3. Forum Endlagersuche, 17. Oktober 2024, online.

Sardo, S.; Müller, L.; Kuppler, S.; Scheer, D.:

What can we do for tomorrow? New sensitivities for long-term governance, Panel 053, European Association for the Study of Science and Technology and the Society for Social

- Studies of Science: Conference Making and Doing Transformations (EASST/4S 2024), Amsterdam, Niederlande, 16.–19. Juli 2024
- Scheer, D.; Venghaus, S.; Sardo, S.; Stark, S.; Kuppler, S.; Schmidt, M.; Hoyer-Klick, C.: A framework concept of Long-term Governance, 2024. European Association for the Study of Science and Technology and the Society for Social Studies of Science: Conference Making and Doing Transformations (EASST/4S 2024), Amsterdam, Niederlande, 16.–19. Juli 2024
- Smeddinck, U.:
Lernendes Verfahren – ein partizipativer Klärungsprozess, Vortrag bei der TRANSENS-Abschlussveranstaltung für Bürgerinnen und Bürger, Leibniz-Haus Hannover, 13. September 2024
- Smeddinck, U.:
Demokratisierung der Regulierung – das „lernende“ Standortauswahlverfahren für ein Endlager zwischen Selbstermächtigung und kollaborativer Mission, Vortrag anlässlich der 3. ICON-S Deutschland-Tagung "(Re)Vision", Mannheim, 26. September 2024
- Smeddinck, U.:
Politikberatung als Mission? Kollaborative und co-evolutive Konkretisierung des „lernenden“ Standortauswahlverfahrens für ein Endlager hochradioaktiver Abfälle, Vortrag auf der NTA11-Konferenz „Politikberatungskompetenzen heute“, Berlin, 20. November 2024
- Smeddinck, U.:
Schneller, sicher, transparent - geht das? Pointierte Anmerkungen aus rechtlicher Sicht, Impulsvortrag anlässlich des 3. Forums Endlagersuche; Würzburg, 23. November 2024

Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer: Leibniz Universität Hannover, Welfengarten 1, 30167 Hannover		Förderkennzeichen: 02 E 11849F
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt F		
Zuordnung zum FuE-Programm: D2.1 Long-Term Governance		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2019 bis 31.03.2025		Berichtszeitraum: 01.07.2024 bis 31.12.2024
Gesamtkosten des Vorhabens: 3.473.288,00 EUR		Projektleiter: Prof. Dr. Walther

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

In TRANSENS soll transdisziplinär geforscht werden: Die interessierte Öffentlichkeit und andere außerakademische Akteure werden planvoll in Forschungskontexte, konkret in Transdisziplinäre Arbeitspakete (TAP) eingebunden. Die Möglichkeiten transdisziplinärer Forschung in der nuklearen Entsorgung werden im Verbund systematisch reflektiert (Transdisziplinaritätsforschung). Spezielle Aktivitäten zielen auf Nachwuchsförderung und Kompetenzerhalt. LUH IRS/IW und ETH Zürich tragen zu allen vier TAP bei: Flexibilität statt linearer Ablauf des Verfahrens: schrittweises Vorgehen, Haltepunkte im Verfahrensablauf, die Option von begründeten Rückschritten und die Reaktion auf neue Forschungsergebnisse sind die Themen der transdisziplinären Forschung im TAP HAFF. Dialog und Diskurs sind Schlüssel zur Verständigung. Die Erforschung der Gelingensbedingungen für die Endlagerung als Gesamtziel in DIPRO erfolgt durch die transdisziplinäre Betrachtung dieser Thematik mit dem Ziel gute Bedingungen für eine erfolversprechende Lösung zu erreichen. Basierend auf disziplinären und interdisziplinären Wissensbasen wird dabei untersucht wie Teile der Gesellschaft in die Entscheidungsprozesse eingebunden werden können und welche Konsequenzen das für das Gelingen des Prozesses hat. Hierbei sind Gerechtigkeitsfragen, bekannte und unbekannte Wissensbestände ebenso wie das daraus resultierende Konfliktpotential Forschungsgegenstand, wobei die Verzwicktheit von Problem, Kommunikation und Entscheidungsprozeduren im gesellschaftlichen Diskurs erarbeitet werden sollen. Mittels einer Workshoparbeit werden dabei transdisziplinäre Formate entwickelt, welche die Basis der methodischen Umsetzung darstellen. Durch die Installation einer Laienbegleitgruppe unterliegt DIPRO einem internen transdisziplinären Audit. Damit soll eine Reflexion der durchgeführten Arbeiten möglich werden und den Weg für die guten Gelingensbedingungen zu glätten. 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 B: Wicked Problem
 Workshop D: Darstellung technischer Randbedingungen
 Workshop F: Transdisciplinarity meets reality – Lessons learned

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

IRS: TAP TRUST (Modul 1): Die abschließenden qualitativen Interviews mit zwölf AGBe-Mitgliedern wurden ausgewertet und ein Bericht erstellt, der sich im TRENSENS-Reviewverfahren befindet. Weitere Berichte zu Vertrauen und den AGBe-Workshops wurden veröffentlicht, wie auch das Paper über Fairness, Sicherheit und Akzeptanz (im Journal of Risk Research). Ein Manuskript ist eingereicht (bei Sustainability) sowie eines nach Überarbeitung neu eingereicht (bei JIES). Zudem ist eines aus dem Review (im Journal Ambio) zurück. Dessen Überarbeitung wird die nächste Zeit in Anspruch nehmen, die Chancen für eine Veröffentlichung stehen jedoch gut. Zwei Vorträge zur Arbeit mit der AGBe wurden gehalten in Utrecht (ITD2024) und Berlin (PartWiss24).

- TAP TRUST (Modul 2): Neben den regelmäßigen Messungen gemeinsam mit Bürger*innen wurden umfangreiche Probenahmen zur radioökologischen Belastung an der Asse, sowie zur Radionuklidbelastung der Oker durchgeführt. Ein Bericht zur gesammelten Erfahrung an der Asse befindet sich zurzeit in der internen Begutachtung.
- TAP SAFE (Modul 6): Die Selen-Säulenversuche wurden fortgeführt. Es wurden neue Charge Batch-Versuche für genauere Redox-Messungen angesetzt. Auf dieser Grundlage wurde die Validierungstudie des UNiSeCs-Modells mit deutlich besserem Ergebnis wiederholt und auf der Tagung der Fachgruppe Nuklearchemie der GDCh präsentiert. Das Webtool zur Biosphärenmodellierung wurde auf den Jahrestagungen der "International Radiation Protection Association" und des Fachverbands für Strahlenschutz vorgestellt. Außerdem wurden die im Projekt erarbeiteten Ergebnisse für die TRANSENS Abschlussveranstaltung aufgearbeitet.
- EDU: Die TRANSENS Abschlussveranstaltung wurde vom 13. – 14.09 im Leibnizhaus als öffentliche Veranstaltung organisiert und abgehalten. Dabei stand am ersten Tag die Fachöffentlichkeit, am zweiten Tag ein breites interessiertes Publikum im Fokus. Die Ringvorlesung wurde fortgesetzt.
- IW: TAP DIPRO: Im TAP DIPRO wurde im Rahmen der TD-Taskforce mit der DIPRO-Begleitgruppe (DIPRO-BG) gearbeitet. Im Rahmen der Ergebniskonsolidierung wurden die Ergebnisse zu den Workshops aufgearbeitet und es erfolgten die Planungen der Beiträge auf der Abschlusskonferenz. Das Team LUH-IW im TAP DIPRO konnte diesbezüglich das Rollenspiel aus Workshop D erfolgreich auf der Abschlusskundgebung präsentieren und für und mit den Besuchern nachspielen, um die TRANSENS Arbeit nachvollziehbar für die Bürger zu präsentieren.

4. Geplante Weiterarbeiten

- IRS: TAP TRUST (Modul 1): Im Wesentlichen stehen Überarbeitungen von eingereichten Veröffentlichungen an inklusive des TRANSENS-Berichts. Außerdem wird an der sauberen Dokumentation der Ergebnisse auch unter Datenschutzaspekten gearbeitet (z.B. Adressen der AGBe-Mitglieder oder persönlichen Daten der SurveyteilnehmerInnen).
- TAP TRUST (Modul 2): Der Erfahrungsbericht soll veröffentlicht und die Ergebnisse der Messstelle öffentlich vorgestellt werden. Aufbauend auf den gemachten Erfahrungen wird ein Konzept für einen Weiterbetrieb der Messstelle in der Zukunft erarbeitet.
- TAP SAFE (Modul 6): Die Säulenversuche sollen abgeschlossen und modelltechnisch ausgewertet werden. Die Ergebnisse der Modellierungsarbeiten sollen im Rahmen der MARC XIII Konferenz vorgestellt werden.
- (EDU): Die Ringvorlesung wird fortgeführt. Laufende Abschlussarbeiten werden nach Möglichkeit innerhalb der Projektlaufzeit abgeschlossen.
- IW: TAP HAFF: Weitere Textarbeit zur Darstellung der Vorbereitung, Durchführung und Auswertung der Arbeiten. Arbeit an der Abschlussberichterstattung.

- TAP DIPRO: Weitere Textarbeit zur Darstellung der Vorbereitung, Durchführung und Auswertung der Arbeiten. Arbeit an der Abschlussberichterstattung.

5. Berichte, Veröffentlichungen

U.a.:

- (1) Bister, S., Richert, K., Schulz, W., Szidat, S. & Walther, C. (2024). Umweltüberwachung aus Sicht der Bevölkerung gedacht. *Strahlenschutzpraxis*, 30(3). Verfügbar unter: <https://www.strahlenschutzpraxis.com/beitrag/umweltueberwachung-aus-sicht-der-bevoelkerung-gedacht/>
- (2) Seidl, R., Drögemüller, C., Krütli, P. & Walther, C. (2024, 5. Dezember). *Öffnung der Forschung im Bereich der Entsorgung nuklearer Abfälle: Chancen und Herausforderungen einer Bürgerarbeitsgruppe*. PartWiss2024, Berlin. Verfügbar unter: <https://www.partizipation-wissenschaft.de/programm/>
- (3) Seidl, R., Drögemüller, C., Krütli, P. & Walther, C. (2024, 4. November). *Opening research in nuclear waste management: opportunities and challenges of a Citizens' Working Group*. ITD Conference 2024, Utrecht. Verfügbar unter: <https://itd-alliance.org/itd24/>
- (4) Walther, C., Röhlig K.-J., Seidl, R., Drögemüller, C., Krütli, P., Schulz, W. (2024, 10. Juli). *Transdisciplinary research on nuclear waste management in Germany: A novel approach for involvement of the public*. IRPA 16, Orlando. Verfügbar unter: <https://burkclients.com/IRPA/2024/site/files/2024%20IRPA-HPS%20Conference%20Program.pdf>
- (5) Kogiomtjidis, A., Walther, C. (2024, 09. Juli) *An interactive Web Tool for Communicating Dose Estimates* IRPA 16, Orland. Verfügbar unter: <https://burkclients.com/IRPA/2024/site/files/2024%20IRPA-HPS%20Conference%20Program.pdf>
- (6) Wolfgang Schulz, (2024, 13. September). *TRUST 2 - Umweltüberwachung von natürlichen und künstlichen Radionukliden gemeinsam mit Bürgerinnen und Bürgern - Herausforderungen und Chancen*. TRANSENS Abschlussveranstaltung, Hannover.
- (7) Wolfgang Schulz, (2024, 13. September). *EDU -Reichweite von und Beteiligung in EDU-Formaten*. TRANSENS Abschlussveranstaltung, Hannover.
- (8) Schulz, W., Richert, K., Bister, S., Szidat, S., Walther, C. (2024, 16. September). *C-14 und H-3 in Umweltarchiven aus der Umgebung der Schachanlage Asse II, Messungen gemeinsam mit Bürgerinnen und Bürgern der Region* Tagung des Fachverbands Strahlenschutz, Berlin. Verfügbar unter: https://www.fs-ev.org/fileadmin/user_upload/90_Archiv/FS-Pub-Archiv-final/JT-2024_187T.pdf
- (9) Schulz, W., Walther, C. (2024, 27. November). *The Remlingen Public Lab for Radioactivity Measurements - Exploring the Potential for Science-Citizen Collaborations in an Emotionally Charged Debate Environment*; 6th International Conference on Radioecology & Environmental Radioactivity, Marseille. Verfügbar unter: <https://www.icrer2024.org/en/programme?day=2024-11-27>
- (10) Kogiomtjidis, A., Walther, C., (2024, 18. September). *Ein Interaktives Web-Tool zur Biosphärenmodellierung*. Tagung des Fachverbands Strahlenschutz, Berlin. Verfügbar unter: https://www.fs-ev.org/fileadmin/user_upload/90_Archiv/FS-Pub-Archiv-final/JT-2024_187T.pdf
- (11) Kogiomtjidis, A., (2024, 13. u. 14. September) *Visualisierung; Untersuchen Sie mithilfe eines interaktiven Webtools den Transport von radioaktiven Stoffen in der Umwelt*. TRANSENS Abschlussveranstaltung, Hannover.
- (12) Kogiomtjidis, A., Sassenberg, N., Schmalz, T., Elgert E., Hormann, V., Walter, C., (2024, 05. November) *Modelling Selenium Sorption in Soil*. Jahrestagung der Fachgruppe Nuklearchemie 2024, Karlsruhe. Verfügbar unter: <https://veranstaltungen.gdch.de/microsite/index.cfm?l=11636&modus=>
- (13) Kogiomtjidis, A., (2024, 13. Spetember) *Safety Case: Stakeholder-Perspektiven und Transdisziplinarität*. TRANSENS Abschlussveranstaltung, Hannover.
- (14) Kogiomtjidis, A., (2024, 13. Spetember) *(Inter-)disziplinäre Forschung im TAP SAFE*. TRANSENS Abschlussveranstaltung, Hannover.

- (15) Seidl, R. & Drögemüller, C. (2024). Procedural fairness and safety in the acceptance of nuclear waste disposal in Germany: an empirical study. *Journal of Risk Research*, 1–17. <https://doi.org/10.1080/13669877.2024.2431896>
- (16) Seidl, R., Krütli, P., Othmer, J. A., Mintzlauff, V., Neumann, H., Stracke, J. & Klein, H. (Autor), 10.09.2024. *TRANSENS (Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle in Deutschland): WRINT: Wer redet ist nicht tot*, Podcast WRINT. Verfügbar unter: https://files.wrint.de/WR1621_TRANSENS.mp3
- (17) Drögemüller, C. & Seidl, R. (2024). Vertrauen und Wissen durch Augenhöhe: Die Arbeitsgruppe Bevölkerung im Projekt TRANSENS. In M. Heiermann, C. Drögemüller, A. Kogiomtjidis & R. Seidl (Hrsg.), *Transdisziplinäre Ansätze in der nuklearen Entsorgungsforschung: Erfahrungen und Reflexionen aus dem Projekt TRANSENS* (TRANSENS-Bericht, Bd. 17, S. 52–67). Clausthal. <https://doi.org/10.21268/20240529-2>
- (18) Seidl, R. (2024). *Vertrauen bei der Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland: Ergebnisse der zweiten bundesweiten Befragung (2022)*. Clausthal. Verfügbar unter: <https://doi.org/10.21268/20240815-0>
- (19) Seidl, R. & Drögemüller, C. (2024). *Die Workshops mit der Arbeitsgruppe Bevölkerung im Arbeitspaket TRUST*. Clausthal. <https://doi.org/10.21268/20240917-1>

Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer: Öko-Institut e. V., Rheinstraße 95, 64295 Darmstadt		Förderkennzeichen: 02 E 11849G
Vorhabenbezeichnung: Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt G		
Zuordnung zum FuE-Programm: D2.1 Long-Term Governance C3.3 Werkzeuge der Sicherheitsanalysen		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2019 bis 30.09.2024		Berichtszeitraum: 01.07.2024 bis 31.12.2024
Gesamtkosten des Vorhabens: 505.379,00 EUR		Projektleiterin: Julia Neles

1. Vorhabenziele / Bezug zu anderen Vorhaben

In TRANSENS soll transdisziplinär geforscht werden: Die interessierte Öffentlichkeit wird planvoll in Forschungskontexte, konkret in vier Transdisziplinäre Arbeitspakete (TAP) eingebunden. Die Möglichkeiten transdisziplinärer Forschung in der nuklearen Entsorgung werden im Verbund systematisch reflektiert (Transdisziplinaritätsforschung). Weitere Aktivitäten zielen auf Nachwuchsförderung und Kompetenzerhalt. Die Expertise des Öko-Instituts wird insbesondere in die TAPs HAFF und SAFE einbezogen.

Das TAP HAFF fokussiert auf die Flexibilität des Verfahrens, die statt eines linearen Ablaufs, ein schrittweises Vorgehen ermöglicht, das Haltepunkte im Ablauf und die Option von Rücksprüngen sowie die Reaktion auf neue Forschungsergebnisse vorsieht. Das TAP SAFE fokussiert u.a. auf Fragen der Kommunikation und des Umgangs mit Ungewissheiten im Rahmen des Safety Case (SC). Dabei wird transdisziplinär untersucht, ob und inwieweit Sichtweisen von Nicht-Spezialisten nahelegen, das Konzept des SC anzupassen oder weiterzuentwickeln.

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

TAP HAFF: Handlungsfähigkeit und Flexibilität in einem reversiblen Verfahren

Das TAP gliedert sich in drei Module, an allen drei ist das Öko-Institut beteiligt, wobei Modul 2 vom Öko-Institut verantwortet wird, und beinhaltet u.a. folgende Arbeitsschritte:

- Literaturrecherche,
- Experten-Interviews zu Raumwirkungen von kerntechnischen Entsorgungsanlagen,
- Transdisziplinärer Workshop mit Praxisakteuren zum Umgang mit räumlichen Transformationen sowie leitfadengestützte Interviews zu räumlicher Identität und Entwicklung eines raumsensiblen Longterm Governance-Konzeptes,
- Visuelles Experiment zur Wirkung von räumlichen Transformationen (Landschaftswandel) mit Praxisakteuren,
- Fokusgruppe mit Stakeholdern zur Prüfung und Weiterentwicklung der konzeptionellen Ideen,
- Analyse der Interviews zur Entwicklung partizipativer Ausgestaltungsempfehlungen; Erfahrungen aus dem Schweizer Fall,
- Synthese der Ergebnisse und Entwicklung von Handlungsempfehlungen zum Umgang mit raumzeitlichen Spezifika unter Berücksichtigung von Haltepunkten und Rücksprüngen.

TAP SAFE: Stakeholder-Perspektiven und Transdisziplinarität

Das TAP gliedert sich in sieben Module, an vier Modulen ist das Öko-Institut beteiligt. Das Öko-Institut unterstützt mit eigenen Arbeiten den Diskurs.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im September hat das Abschlusstreffen in Hannover mit aktiver Teilnahme des Öko-Instituts stattgefunden. Daneben nahm das Öko-Institut an Treffen des TAP HAFF und des TAP SAFE sowohl in Präsenz als auch virtuell teil.

TAP HAFF: Modul 1: Aus der Bearbeitung der Thematik der Neugenehmigung von Zwischenlagern nach 40 Jahren Betriebszeit ist der TRANSENS-Bericht Nr. 25, „Aspekte im Hinblick auf eine Neugenehmigung von Zwischenlagern für hochradioaktive Abfälle und abgebrannte Brennelemente nach 40 Jahren Betriebszeit“ kurz vor Veröffentlichung.

Modul 2: Derzeit ist ein TRANSENS-Bericht zu den Gesamtergebnissen des Modul 2 in Fertigstellung. Die im Juli durchgeführte Fokusgruppe mit (dt.) Akteuren, die im Schweizer Sachplanverfahren geologische Tiefenlager beteiligt sind, wird derzeit ausgewertet. Die Ergebnisse werden im TRANSENS-Bericht veröffentlicht. Des Weiteren wurden Beiträge zum Abschlussbericht des TAP HAFF und zum Magazin über das TRANSENS-Vorhaben geleistet.

TAP SAFE: Hier arbeitete das Öko-Institut am Abschlussbericht des TAP SAFE mit.

4. Geplante Weiterarbeiten

In beiden TAPs werden die Abschlussberichte fertiggestellt.

TAP HAFF: Die Veröffentlichung der TRANSENS-Berichte ist Anfang 2025 geplant.

TAP SAFE: Die Arbeiten sind abgeschlossen.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Mbah, M.; Kelly, R.; Kuppler, S.; Brohmann, B. (i.E.): Ansatz einer raumsensiblen Long-term Governance der Entsorgung hochradioaktiver Abfälle. TRANSENS-Bericht.

Mbah, M.; Kuppler, S.; Brohmann, B. (2024): Ansatz einer raumsensiblen Governance der Entsorgung. Vortrag bei der TRANSENS-Abschlusskonferenz. Hannover. 13.09.2024.

Mbah, Melanie, Brohmann, B.; Neles, J. (2024): Sicherheitsmanagement und -kultur. Vortrag bei der TRANSENS-Abschlusskonferenz. Hannover. 13.09.2024.

Mbah, M.; Kuppler, S. (2024): Place-sensitive long-term governance of nuclear waste. Vortrag bei der EASST/4s Conference. Amsterdam. 19.07.2024.

Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer: Technische Universität Berlin – Fachgebiet Wirtschafts – und Infrastrukturpolitik		Förderkennzeichen: 02 E 11849H
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: „Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt H		
Zuordnung zum FuE-Programm: D2.1 Long-Term Governance		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2019 bis 31.03.2025	Berichtszeitraum: 01.07.2024 bis 31.12.2024	
Gesamtkosten des Vorhabens: 362.577,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Christian von Hirschhausen	

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

In TRANSENS soll transdisziplinär geforscht werden: Die interessierte Öffentlichkeit und andere außerakademische Akteure werden planvoll in Forschungskontexte, konkret in Transdisziplinäre Arbeitspakete (TAP) eingebunden.

Die Möglichkeiten transdisziplinärer Forschung in der nuklearen Entsorgung werden im Verbund systematisch reflektiert (Transdisziplinaritätsforschung). Spezielle Aktivitäten zielen auf Nachwuchsförderung und Kompetenzerhalt.

Dialog und Diskurs sind Schlüssel zur Verständigung. Wie muss der langwierige Prozess gestaltet werden, um dafür gute Bedingungen auf dem Entsorgungspfad zu schaffen? Das ist Gegenstand der transdisziplinären Forschung im TAP DIPRO.

Das Fachgebiet für Wirtschafts- und Infrastrukturpolitik erarbeitet im TAP DIPRO auf der Grundlage disziplinärer und interdisziplinärer Forschung eine Bewertung der volkswirtschaftlichen Vorteilhaftigkeit von Organisationsmodellen bzw. Governance-Strukturen an der Schnittstelle zwischen den Prozessen des Rückbaus, der Lagerung und der Standortsuche. Unter Berücksichtigung ingenieurwissenschaftlicher Erkenntnisse sollen mögliche Synergieeffekte und Hindernisse, die eventuell Verzögerungen oder Kostensteigerungen verursachen könnten, herausgearbeitet werden. Des Weiteren erarbeitet bzw. eruiert das Fachgebiet, basierend auf Wissen über monetäre und nicht-monetäre Anreizstrukturen in Kooperation mit anderen Partnern verschiedene Kompensationsszenarien und gesellschaftliche Möglichkeiten distributiver Gerechtigkeit im Umgang mit Lasten- und Verantwortungsverteilung.

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

Das Arbeitsprogramm des TAP DIPRO gliedert sich in drei Module, wovon ein Modul der wissenschaftlichen Vorbereitung und ein Modul der Synthese dient. Im Zentrum steht das Praxismodul mit einer Reihe aus drei Workshops für Teilnehmer aus dem nicht-akademischen Bereich, in denen jeweils unterschiedliche Aspekte von Gerechtigkeit, Recht und Governance behandelt werden. Bei der Workshop-Organisation wechseln sich die DIPRO-Partner ab. Alle Projektpartner (im TAP DIPRO) sind bei den Workshops vertreten.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- Verfassen der Beiträge für das TRANSENS Magazin („Project Insights 2024“).
- Teilnahme des Teams der TUB an der Abschlussveranstaltung am 13. und 14. September 2024 in Hannover mit Präsentation der zentralen Forschungsarbeiten vor Fachpublikum am 13. September, sowie einer gemeinsam mit Achim Brunnengräber (FU Berlin) durchgeführten Präsentation der zentralen Herausforderungen bezüglich der Finanzierung der Entsorgung radioaktiver Abfälle in Deutschland für interessiertes fachfremdes Publikum aus der Gesellschaft am 14. September. Weiterhin Aufbau und Betreuung der Wanderausstellung „Einfach Mal Abschalten“ und Präsentation der transdisziplinären Begleitprodukte.
- Fabian Präger hat am 2. Oktober 2024 seine u.a. im Rahmen des TRANSENS Projekts entstandene Dissertation verteidigt. Am 28. Oktober 2024 ist Fabian Präger in Elternzeit gegangen. Er wird zum Jahreswechsel zurückkehren.
- Uraufführung des transdisziplinären Dokumentarfilms „Einfach Mal Zwischenlagern“ am 21. Oktober 2024, der im Rahmen der an der TUB durchgeführten Lehre als Nachfolgeprojekt des Fotobands „Einfach Mal Abschalten“ entstanden ist.
- Teilnahme des Teams der TUB am Forum Zwischenlagerung der BGZ in Berlin am 28. Oktober 2024 inkl. Durchführung eines Workshops durch Alexander Wimmers mit dem Thema der Generationengerechtigkeit im Kontext der Langzeitzwischenlagerung sowie Aufführung des o.g. Dokumentarfilms.
- Digitale Durchführung der Ringvorlesung „Kernenergie und Brennstoffkreislauf“ (organisiert durch Prof. Dr. Clemens Walther (LUH Hannover)) am 5. November 2024 von Alexander Wimmers.
- Gemeinsam mit Konrad Ott (CAU Kiel), Klaus-Jürgen Röhlig (TU Clausthal) veröffentlichten Prof. Dr. Christian von Hirschhausen und Fabian Präger im November 2024 einen Beitrag im Online-Supplement „Plus“ des Forschungsjournal Neue Soziale Bewegungen.
- Teilnahme von Prof. Dr. Christian von Hirschhausen am Forum Endlagerung in Würzburg am 23. November 2024. Präsentation von Zwischenergebnisse zu Forschungsarbeiten zur Finanzierung der Entsorgung radioaktiver Abfälle in Deutschland.
- Ein Working Paper zur langfristigen Finanzierung der Entsorgung radioaktiver Abfälle in Deutschland unter Unsicherheit ist auf einem Pre-Print-Server veröffentlicht worden.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Wissenschaftliche Arbeiten zum Thema der Finanzierung werden weitergeführt und zu Ende gebracht.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Awawda, Mahdi, Wimmers, Alexander (2024) A Scenario-Based Assessment of the Long-Term Funding Adequacy of the German Nuclear Waste Fund KENFO, Preprint uploaded to arXiv; DOI: 10.48550/arXiv.2412.16126.

Von Hirschhausen, Christian, Wimmers, Alexander, Präger, Fabian (2024), Die Atomwende und transdisziplinäre Begleitprodukte, In: Walther, Clemens (Hrsg.) Project Insights 2024, TRANSENS Magazin, S. 36-37.

Ott, Konrad, Röhlig, Klaus-Jürgen, Präger, Fabian, von Hirschhausen, Christian (2024), Für mehr Tempo in der Endlagerung hochradioaktiver Abfälle, Forschungsjournal Soziale Bewegungen Plus, 37(4).

Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer: TU Braunschweig, Postfach 3329, 38023 Braunschweig		Förderkennzeichen: 02 E 11849I
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt I		
Zuordnung zum FuE-Programm: D2.3 Multi-kriterielle Entscheidungsprozesse C2.4 Monitoring		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2019 bis 31.03.2025		Berichtszeitraum: 01.07.2024 bis 31.12.2024
Gesamtkosten des Vorhabens: 1.239.091,00 EUR		Projektleiter: Prof. Dr.-Ing. Stahlmann

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Im Verbundvorhaben TRANSENS wird erstmalig in Deutschland transdisziplinäre Forschung zur nuklearen Entsorgung in größerem Maßstab betrieben. Die interessierte Öffentlichkeit und andere außerakademische Akteure werden planvoll in Forschungskontexte, konkret in Transdisziplinäre Arbeitspakete (TAP) eingebunden:

- HAFF: Handlungsfähigkeit und Flexibilität in einem reversiblen Verfahren
- SAFE: Safety Case: Stakeholder-Perspektiven und Transdisziplinarität
- TRUST: Technik, Unsicherheiten, Komplexität und Vertrauen
- DIPRO: Dialoge und Prozessgestaltung in Wechselwirkung von Recht, Gerechtigkeit und Governance

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

In einem Verfahren, das die Rückholung eingelagerter Abfälle im Falle einer ungünstigen Entwicklung des Lagers vorsieht, muss man sich frühzeitig Gedanken machen über Monitoring-Strategien, Entscheidungswege, Entscheidungsträger und Verantwortlichkeiten. Dies ist Gegenstand des TAP TRUST.

Flexibilität statt linearer Ablauf des Verfahrens: schrittweises Vorgehen, Haltepunkte im Verfahrensablauf, die Option von begründeten Rückschritten und die Reaktion auf neue Forschungsergebnisse sind die Themen der transdisziplinären Forschung im TAP HAFF.

Dialog und Diskurs sind Schlüssel zur Verständigung. Wie muss der langwierige Prozess gestaltet werden, um dafür gute Bedingungen auf dem Entsorgungspfad zu schaffen? Das ist Gegenstand der transdisziplinären Forschung im TAP DIPRO.

Das IGG der TU Braunschweig ist in TAP TRUST eingebunden und bearbeitet Fragestellungen zu Monitoring und zur Akzeptabilität von Ungewissheiten während der Beobachtungsphase und einer Rückholung.

Das 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 iBMB beteiligte sich am TRANSENS-Bericht mit dem Titel „Aspekte im Hinblick auf eine Neugenehmigung von Zwischenlagern für hochradioaktive Abfälle und abgebrannte Brennelemente nach 40 Jahren Betriebszeit“ zusammen mit dem Ökoinstitut, KIT INW und der LU Hannover. Isabelle Scharf hat als neue Mitarbeiterin in TRANSENS die Berichterstellung übernommen.

Die TU Braunschweig hat ihren Betrag zur TRANSENS-Abschlusskonferenz geleistet. Am Wissenschaftstag, dem 13.09.2024, hatte sich das iBMB an zwei Postern zum adaptiven Lebensdauermanagement von Infrastrukturen und Gebäuden am Endlagerstandort und im Kontext der verlängerten Zwischenlagerung in Kooperation beteiligt. Das IGG stellte die Ergebnisse seiner Arbeit im Rahmen eines Vortrages vor. Am Tag 2 mit Öffentlichkeitsbeteiligung, dem 14.09.2024, beteiligte sich das iBMB am Marktstand zum visuellen Experiment zusammen mit dem Ökoinstitut und der Uni Kassel. Hierzu wurde der virtuelle Rundgang durch das am iBMB erstellte Modell der Oberflächenanlagen entsprechend aufbereitet. Das IGG führte einen Workshop mit dem Titel „Die Entscheidung zur Rückholung, oder was kann schon passieren?“ durch. Weiterhin veranschaulichte das IGG den Standortauswahlprozess durch ein Spiel und die für die Endlagerung relevanten Zeiträume durch den Blick in die jüngere und die geologische Vergangenheit der letzten Million Jahre („Zeitlinien“).

Das IGG hat weiter an der Dokumentation des Projektes gearbeitet. Das Bürgergutachten zur Rückholung wurde fertig gestellt und ist derzeit im TRANSENS-internen Review-Prozess. Mit einer studentischen Exkursion der Universität Frankfurt wurden in Zusammenarbeit mit der TU Clausthal und dem iBMB intensiv mögliche Optionen zur Entsorgung von hochradioaktiven Abfällen diskutiert.

4. Geplante Weiterarbeiten

In den verbleibenden 3 Monaten werden die in TRANSENS erarbeiteten Ergebnisse weiter aufbereitet und Publikationen sowie studentische Arbeiten zu den Themen Lebensdauermanagement und Dauerhaftigkeit mit dem Schwerpunkt auf Schädigungs- und Alterungsmechanismen bei Stahlbetonbauwerken sowie Rückholung und Ungewissheiten erstellt.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Neles, J., Becker, F., Hassel, T., Leusmann, T., Metz, V., Scharf, I. (2024): Aspekte im Hinblick auf eine Neugenehmigung von Zwischenlagern für hochradioaktive Abfälle und abgebrannte Brennelemente nach 40 Jahren Betriebszeit nach 40 Jahren Betriebszeit. Braunschweig, Darmstadt, Hannover, Karlsruhe, TRANSENS-Bericht-25. DOI: 10.21268/20241213-0

Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer: Universität Kassel, Arbeits- und Organisationspsychologie		Förderkennzeichen: 02 E 11849J
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt J		
Zuordnung zum FuE-Programm: D1.1 Methoden und Instrumente des Wissens- und Kompetenzmanagements D2.2 Sicherheitskultur und Mechanismen der Fehlerkorrektur im selbst hinterfragenden System		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2019 bis 31.03.2025	Berichtszeitraum: 01.07.2024 bis 31.12.2024	
Gesamtkosten des Vorhabens: 327.569,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. habil. Oliver Sträter	

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

In TRANSENS soll transdisziplinär geforscht werden: Die interessierte Öffentlichkeit und andere außerakademische Akteure werden planvoll in Forschungskontexte, konkret in vier Transdisziplinäre Arbeitspakete (TAP) eingebunden. Die Möglichkeiten transdisziplinärer Forschung in der nuklearen Entsorgung werden im Verbund systematisch reflektiert; spezielle Aktivitäten zielen auf Nachwuchsförderung und Kompetenzerhalt.

Im TAP HAFF soll Flexibilität statt ein linearer Ablauf des Verfahrens erarbeitet werden durch ein schrittweises Vorgehen, mit Haltepunkten im Verfahrensablauf, der Option von begründeten Rückschritten und Reaktion auf neue Forschungsergebnisse.

Im TAP SAFE wird untersucht, ob und inwieweit Sichtweisen von Nicht-Spezialisten nahelegen, das Konzept des Safety Case anzupassen oder weiterzuentwickeln, um so die Diskurs- und Beratungsfähigkeit zu verbessern. Weiterhin wird untersucht, ob und inwieweit Sichtweisen von Nicht-Spezialisten nahelegen, das Konzept des Safety Case anzupassen oder weiterzuentwickeln, um so die Diskurs- und Beratungsfähigkeit zu verbessern.

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

Das Fachgebiet Arbeits- und Organisationspsychologie beteiligt sich insbesondere am TAP HAFF und TAP SAFE mit folgenden Arbeitspaketen:

- HAFF AP 1: Psychologische Aspekte bei der Entscheidungsfindung für Haltepunkte und Rückschritte.
- HAFF AP 2: Unterstützung des schrittweisen Verfahrens hinsichtlich einer positiven Sicherheits- und Fehlerkultur.
- HAFF AP 3: Anwendung der Methodik auf Szenarien.

sowie

- SAFE AP 1: Bestandsaufnahme ganzheitlicher, systemischer Effekte der menschlichen Zuverlässigkeit auf den Umgang mit Sicherheitsanforderungen.
- SAFE AP 2: Methode zur Berücksichtigung der Aspekte der menschlichen Zuverlässigkeit in den Einschätzungen und Bewertungen von Ungewissheiten.
- SAFE AP 3: Anwendung der Methodik auf Modellrechnungen und Ergebnisdiskussionen.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Übergeordnet: Auf dem öffentlichen Abschlusstreffen des Projektes wurden die Ergebnisse des Fachgebietes in TAP HAFF und TAP SAFE gemeinschaftlich vorgestellt und ein Planspiel zum Thema „Menschliche Zuverlässigkeit“ durchgeführt werden. Dabei wurde auch die Bedeutung des td-Ansatzes für die Themen der menschlichen Zuverlässigkeit in HAFF und SAFE sichtbar gemacht und als Poster vorgestellt.

HAFF AP 1-3 und SAFE AP 1-3: Zusammenfassende Darstellung der Methodik zur Bewertung des Einflusses menschlicher Zuverlässigkeit zur Vermeidung des Drift-into-failure Konzeptes bei Endlager-Fragestellungen und zur Sicherstellung der Handlungsfähigkeit und Sicherheitskultur auf dem öffentlichen TRANSENS-Abschlusstreffen, inkl. Darstellung des Ansatzes als Poster.

HAFF AP 1-3 und SAFE AP 1-3: Panel-Impuls auf dem 3. Forum Endlagersuche der BASE in Würzburg zur Bedeutung der Sicherheitskultur in der aktuellen Diskussion der zeitlichen Beschleunigung des Suchverfahrens und mögliche Folgen durch mangelnde menschliche Zuverlässigkeit.

HAFF AP 3: Durchführung des Abschlusstreffens in Hannover mit einem Planspiel „Menschliche Zuverlässigkeit“

HAFF AP 3: Ausweitung des Ansatzes zur multimedialen Unterstützung durch: a) Bachelorarbeit, Jalil, M. R. (2024) zur Beeinflussung von Emotionen in Gruppensituationen bei Windkraftanlagen in multimedialen Umgebungen. b) das KIT/ITAS baut ein Sustainable Futures Lab nach Vorbild des virtuellen Raums in Kassel für weitergehende Forschungen auf.

SAFE AP 3: Beitrag im TRANSENS-Sammelband zum Thema Faktor Mensch und Ungewissheiten (Open-Access DOI: 10.1007/978-3-658-42698-9)

SAFE AP 3: Methodik zur Umsetzung menschlicher Zuverlässigkeit und Handlungssicherheit gemäß StandAG durch Stärkung der Resilienz von Managementsystemen (Seidel, 2024).

4. Geplante Weiterarbeiten

HAFF AP 1-3 und SAFE AP 1-3: Ausformulierung der Methodik zur Bewertung des Einflusses menschlicher Zuverlässigkeit zur Vermeidung des Drift-into-failure Konzeptes bei Endlager-Fragestellungen und zur Sicherstellung der Handlungsfähigkeit und Sicherheitskultur im Abschlussbericht.

HAFF AP 3: Umsetzung der Methodik zur Sicherheitskultur und zu Biases in aktuellen Szenarien (zeitliche Beschleunigung des Verfahrens).

SAFE AP 3: Erstellung eines Beitrag zu einem Special Issue des Journals RESS (Reliability Engineering and System Safety sowie der Tagung Technische Zuverlässigkeit des VDI (TTZ).

5. Berichte, Veröffentlichungen

Englisch, F. (2024). Diagnostik zur Gestaltung von Einflussfaktoren auf individuelle und kollektive Biases in strategischen Entscheidungsprozessen, Schriftenreihe Arbeits- und Organisationspsychologie, [doi:10.17170/kobra-202403269876](https://doi.org/10.17170/kobra-202403269876)

[Jalil, M. R. \(2024\)](#) Einfluss von Informationen auf die Akzeptanz von Windkraftanlagen, eine empirische Untersuchung im Virtual Space. Bachelorarbeit. Universität Kassel, Fachgebiet Arbeits- und Organisationspsychologie. Kassel.

Seidel, L. (2024). Resilienz in Managementsystemen als Voraussetzung für die Systemintegrität in Großprojekten am Beispiel der Standortauswahl für ein Endlager für hochradioaktive Abfälle, <https://doi.org/10.17170/kobra-2024121010742>

[Sträter, O. \(2024\) Schneller, sicher, transparent - geht das? - Zeitprognosen und Optimierungspotentiale der Standortauswahl. Panel-Impuls auf dem 3. Forum Endlagersuche der BASE. Würzburg.](#)

•

Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer: Karlsruher Institut für Technologie (Großforschungsaufgabe), Institut für Technikfolgen- abschätzung und Systemanalyse		Förderkennzeichen: 02 E 12204
Vorhabensbezeichnung: Formen der Konfliktbearbeitung in der nuklearen Entsorgung (KonE)		
Zuordnung zu den FuE-Feldern des Förderprogramms: D2.2 Sicherheitskultur und Mechanismen der Fehlerkorrektur im selbst hinterfragenden System		
Laufzeit des Vorhabens: 01.11.2024 bis 31.10.2027	Berichtszeitraum: 01.11.2024 bis 31.12.2024	
Gesamtkosten des Vorhabens: 781.239,00 EUR	Projektleiter: Elske Bechthold	

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Im Projekt KonE wird aus sozialwissenschaftlicher Perspektive, sowie inter- und transdisziplinär, analytisch aufbereitet, empirisch erforscht und experimentell ausprobiert wie Konfliktbearbeitung in der nuklearen Entsorgung funktionieren kann. Zum Einsatz kommende Methoden sind Workshops, Expert*innen-Interviews, Literatur- und Dokumentenanalyse und Beobachtung von experimentellen Settings der Konfliktbearbeitung. Das hier skizzierte Forschungsvorhaben verfolgt hinsichtlich der Problemstellung „Konflikte bei der Entsorgung hochradioaktiver Abfälle“ drei Hauptziele:

- Entwicklung und Fortschreibung eines differenzierten und systematisierten Verständnisses soziotechnischer Konflikte der nuklearen Entsorgung im interdisziplinären Austausch;
- Analyse von soziotechnischen Konflikten der nuklearen Entsorgung sowie die Entwicklung von Bewertungskriterien für eine Herangehensweise an informelle Konfliktbearbeitung;
- Entwicklung von Handlungsoptionen und Gestaltungsvorschlägen, die Praxisakteure bei der praktischen Umsetzung von Konfliktbearbeitungsformaten einsetzen können.

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

Arbeitspaket 1: Konzeptionelles Verständnis von soziotechnischen Konflikten und Konfliktkommunikation. Ziel: Entwicklung eines konzeptionellen Verständnisses von soziotechnischen Konflikten und diskursiver Konfliktbearbeitung sowie eines systematischen Zugangs zum Konfliktfeld um die nukleare Entsorgung. Kriterien zur Bewertung von Formaten der Konfliktbearbeitung erarbeiten.

Arbeitspaket 2: Informelle Konfliktbearbeitung bei der Endlagerung – Empirische Erhebung. Ziel: Konfliktfeld der nuklearen Entsorgung in Deutschland unter Einbezug von aktuellen Dokumenten und verschiedenen Formen außer-wissenschaftlichen Wissens darstellen. Prüfen der Bewertungskriterien für Elemente und Formate der informellen Konfliktbearbeitung.

Arbeitspaket 3: Diskursive Modelle der Konfliktbearbeitung – Experimentelle Formate. Ziel: Ansätze der Konfliktbearbeitung entwickeln, experimentell testen und kriteriengestützt bewerten. Vertieftes Verständnis über die Funktion visueller Darstellungen in der Verständigung über Problemstellungen der Entsorgung und Erkenntnisse über das Co-Design von Visualisierungen entwickeln.

Arbeitspaket 4: Kultur der Konfliktbearbeitung: Informelle Formate, hilfreiche Darstellungen, gelingende Kommunikation – Synthese und praxisorientierte Handlungsempfehlungen; Ziel: Arbeitspakete miteinander in Bezug setzen und Handlungsempfehlungen entwickeln, prüfen und zusammenfassend darstellen.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP 1: Erarbeitung eines Literaturkorpus. Die techniksoziologische und konfliktsoziologische Literatur wurde ausgewertet, um den Begriff des soziotechnischen Konflikts zu definieren.

AP 2-4: Erste Planungen und organisatorische Abstimmungen, einschließlich der Abstimmung mit Unterauftragnehmern, wurden vorgenommen. Das Kick-off-Meeting ist für März 2025 geplant, Vorbereitungen hierfür laufen.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP 1: Erarbeitung eines konzeptionellen Verständnisses von soziotechnischen Konflikten als Grundlage für AP 2, 3 und 4.

AP 2: Beginn der empirischen Datenerhebung durch Dokumentenanalysen und Interviews.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Im Berichtszeitraum wurden keine Veröffentlichungen erstellt.

Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer: Forschungszentrum Jülich GmbH, 52425 Jülich		Förderkennzeichen: 02 W 6279
Vorhabensbezeichnung: Neu- und Weiterentwicklung von Konzepten, Methoden und Techniken für die internationale Kernmaterialüberwachung, insbesondere im Rahmen der nuklearen Entsorgung (SAFEGUARDS-3)		
Zuordnung zum FuE-Programm: D3.1 Konzepte zur Kernmaterialüberwachung		
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2019 bis 31.07.2025	Berichtszeitraum: 01.07.2024 bis 31.12.2024	
Gesamtkosten des Vorhabens: 889.554,00 EUR	Projektleiter: Dr. Irmgard Niemeyer	

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Die Bundesregierung soll in ihren Bemühungen unterstützt werden, in Zusammenarbeit mit der IAEO und Euratom das Verifikationssystem zur Nichtweiterverbreitung von Kernwaffen weiterzuentwickeln. Neben der ständigen Verbesserung der Effektivität des Überwachungssystems spielen Gesichtspunkte des Kontrollaufwandes (Effizienz) eine zentrale Rolle. Dieser Aspekt hat besondere Bedeutung bei der erweiterten Aufgabenstellung der IAEO durch das Zusatzprotokoll im Hinblick auf die Entdeckung undeckelter Nuklearmaterialien und Nuklearaktivitäten.

Das Vorhaben baut auf den Ergebnissen der vorangegangenen Vorhaben 02W6184, 02W6218, 02W6232, 02W6243, 02W6259 und 02W6263 auf. Die Arbeiten haben Bezug zum BMWi-Förderkonzept „Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle - (2015-2018)“, zu den strategischen Zielen des 7. Energieforschungsprogramm der Bundesregierung (2018) im Rahmen der Entsorgungs- und Endlagerforschung, zum Nationalen Entsorgungsprogramm (2015) sowie zum BMWi-IAEA Joint Programme. Die Arbeiten werden in enger Abstimmung zwischen Regierung, den Kontrollbehörden IAEO und Euratom, Industrie sowie Forschung und Entwicklung geplant und durchgeführt.

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

- 6.1 Konzepte zur Kernmaterialüberwachung
 - AP 6.1.1 Safeguards-Konzepte für verlängerte Zwischenlagerzeiten
 - AP 6.1.2 Safeguards-Konzepte für unterschiedliche Endlagerkonzepte
 - AP 6.1.3 Safeguards-Konzepte für kerntechnische Anlagen im Rückbau
- 6.2 Methoden und Techniken zur Kernmaterialüberwachung
 - AP 6.2.1 Einschluss und Überwachung
 - AP 6.2.2 Erneute Behälterüberprüfung (Re-Verifikation)
 - AP 6.2.3 Methoden zur Entdeckung von unabhängigen Bergbauaktivitäten und Hohlräumen
 - AP 6.2.4 Geoinformationstechnologien
- 6.3 Kooperation, Kommunikation, Kapazitätsaufbau zur internationalen Kernmaterialüberw.
 - AP 6.3.1 Kooperation mit der Deutschen Gesellschaft für Auswärtige Politik (DGAP)
 - AP 6.3.2 Pflege des nationalen Safeguards-Internet-Portals
 - AP 6.3.3 Nationale Gremien
 - AP 6.3.4 Internationale Gremien

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP 6.1.1: Erarbeitung der konzeptionellen und technischen Anforderungen an die Safeguardsüberwachung der Zwischenlager in Deutschland bis mindestens 2050
- AP 6.1.2: Promotionsprojekt zum Einsatz eines Digitalen Zwillings im Rahmen der Safeguardsüberwachung eines HAW-Endlagers
- AP 6.1.3: Beratung von Anlagenbetreibern zur Safeguardsüberwachung von Anlagen im Rückbau
- AP 6.2.1: Keine
- AP 6.2.2: Auswertung des Feldtests zur Eignung der Myonen-Tomographie zur Re-Verifikation von Brennelementbehältern in den Zwischenlagern; Start eines Promotionsprojektes zur Weiterentwicklung von Analyseverfahren von Myonentomographie-Daten
- AP 6.2.3: Abschluss des Promotionsprojekts zur multitemporalen Satellitenbildanalyse im Rahmen der Safeguardsüberwachung von kerntechnischen Anlagen
- AP 6.2.4: Keine
- AP 6.3.1: Keine
- AP 6.3.2: Keine
- AP 6.3.3: Mitarbeit in der Arbeitsgemeinschaft Kernmaterialüberwachung (AKÜ) sowie im Arbeitskreis Spaltstoffüberwachung des vgb energy e.V.
- AP 6.3.4: ESARDA: Leitung von zwei Arbeitsgruppen und Mitarbeit in weiteren Arbeitsgruppen, dem Executive Board und dem Steering Committee; INMM: Leitung der 'International Safeguards Division'; Mitarbeit bei der Durchführung der INMM-Jahrestagung, Portland, Juli 2024

4. Geplante Weiterarbeiten

- AP 6.1.1: Fortsetzung der o.g. Arbeiten
- AP 6.1.2: Fortsetzung der o.g. Arbeiten
- AP 6.1.3: Keine
- AP 6.2.1: Keine
- AP 6.2.2: Fortsetzung der o.g. Arbeiten
- AP 6.2.3: Keine
- AP 6.2.4: Keine
- AP 6.3.1: Keine
- AP 6.3.2: Keine
- AP 6.3.3: Fortsetzung der o.g. Arbeiten
- AP 6.3.4: Fortsetzung der o.g. Arbeiten; Mitarbeit bei der Vorbereitung des ESARDA Symposiums, Antwerpen, Mai 2025 und der INMM-Jahrestagung, Washington D.C., August 2025

5. Berichte, Veröffentlichungen

- L. Laumen, I. Niemeyer, Combined U-Net and LSTM approach to detect safeguards-relevant changes in Sentinel-2 images. Proc. 56th INMM Annual Meeting, Portland/Oregon, July 2024

Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer: RWTH Aachen		Förderkennzeichen: 02 W 6281	
Vorhabensbezeichnung: Antineutrino-Detektion zur Überwachung radioaktiver Abfälle (NU-SAFEGUARDS)			
Zuordnung zum FuE-Programm: D3.1 Konzepte zur Kernmaterialüberwachung D3.2 Methoden und Techniken zur Kernmaterialüberwachung			
Laufzeit des Vorhabens: 01.05.2022 bis 30.04.2025		Berichtszeitraum: 01.07.2024 bis 31.12.2024	
Gesamtkosten des Vorhabens: 344.338,00 EUR		Projektleiter: Prof. Dr. Achim Stahl	

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

AP5 und AP6 werden aktuell weitergeführt, unter Einbezug des Inputs seitens des FZ Jülichs, sowie Feedback das im Rahmen verschiedener Vorträge gesammelt wurde. Hierzu wurden die vorangehenden Studien genutzt um die erwartete Sensitivität bzw. Detektionszeiten als Abhängigkeit von Detektoreffizienz, Richtungsauflösung sowie Untergrundeignisrate darzustellen. Hierbei wurde sichtbar, dass für das Basisszenario der bisherigen Studien, die Zwischenlagerüberwachung mit 90% Konfidenz innerhalb 12 Monate, eine Untergrundrate von ca. 12 Untergrundeignissen pro Tag pro Detektor nicht überschritten werden darf – dies deckt sich mit den vorherigen Ergebnissen. Bei einer akzeptierten Konfidenz von 50%, entspricht dies jedoch einer Untergrundrate von ca. 400 Untergrundeignissen pro Detektor pro Tag. Die anderen Einsatzszenarien zeigen ein ähnliches Verhalten, d.h. für die direkte Überwachung ist weiterhin die momentan wenig ausgereifte LOr-TPC-Technik erforderlich zur Kontrolle der Untergrundrate. Der Einsatz zur komplementären Überwachung ist jedoch weniger auf diese Technik angewiesen, d.h. die begleitende Überwachung mit anderen Methoden ist voraussichtlich auch mit bereits verfügbarer Technologie theoretisch möglich. Hierbei ist jedoch eine offene Frage, ob das Kosten-Nutzen-Verhältnis gegeben ist – dies ist abhängig von der Mindestgröße des Detektorkonzepts. Hierzu finden nun weitere Arbeiten statt, um eine quantitative Aussage zu treffen.

Gleichzeitig wurde im Rahmen einer nun abgeschlossenen Masterarbeit die Eignung eines simulierten Antineutrino-LOr-TPC Detektors zur Myonenanalyse von nuklearen Abfällen untersucht. Hierbei hat sich eine grundsätzliche Eignung ergeben: ein Antineutrino-LOr-TPC Detektor kann mittels Messung der kosmischen Strahlung innerhalb kurzer Zeit (<1 Std.) die Präsenz von Abfallbehältern (z.B. CASTOR) feststellen. Mit einer marginal längeren Messzeit (<8 Std.) lassen sich auch gefüllte und leere Behälter unterscheiden – dies ist jedoch eine reine Dichtemessung, d.h. radioaktive Abfälle lassen sich nicht von z.B. reinem Schwermetall wie Wolfram o.ä. unterscheiden. Im Rahmen dieser Arbeit wurde zudem festgestellt, dass mit einem Antineutrinodetektor zudem eine Energieanalyse der Myonen durchgeführt werden kann, die konzeptuell Rückschlüsse auf Materialien zulässt, z.B. zur Unterscheidung von Stahl und Uran. Im Umfang der Masterarbeit konnten jedoch noch keine quantitativen Ergebnisse gewonnen werden.

Zusätzlich wurde im Rahmen des Projekts die Organisation einer dreitägigen Konferenz übernommen, des „Applied Antineutrino Physics 2024 (AAP 2024) Workshops“ (siehe: <https://aap2024.physik.rwth-aachen.de/>). Hierbei handelt es sich um eine internationale Konferenz spezifisch zu angewandter Antineutrino-Physik, d.h. mit Hauptanwendungen in der Überwachung von Kernmaterial.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP5 und AP6 werden nun in Zusammenarbeit mit dem FZ Jülich bearbeitet. Aufgrund der noch nicht beendeten Zusammenarbeit wurde die geplante Veröffentlichung nun aufgeteilt in zwei: eine kürzere, fokussiert auf technische Aspekte, die Anfang nächsten Jahres (2025) veröffentlicht werden soll, sowie eine umfangreichere Betrachtung der Einsatzszenarien gegen Projektende.

Darüber hinaus wird nun auch der Endbericht vorbereitet, um eventuell ausstehende Untersuchungen schnellstmöglich zu beenden, um das Projekt komplettieren zu können, Hauptziele sind hier: Konkretisierung der Erkenntnisse für die zuvor identifizierten Einsatzszenarien, Beispieldetektorkonzept für einen LOr-TPC Detektor, sowie einen Szintillationsdetektor als traditioneller Vergleich, Identifizierung von komplementären Technologien für die begleitende Überwachung.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Vorträge:

Y. Schnellbach, "Antineutrino detection concepts for safeguards at spent nuclear fuel facilities". Vortrag bei der Applied Nuclear Physics 2024 (ANP2024) Konferenz (Thessaloniki 26.09.2024).

Y. Schnellbach, "Antineutrino Safeguards for Spent Fuel". Vortrag beim Applied Antineutrino Physics 2024 (AAP 2024) Workshop (Aachen, 28.10.2024)

Berichte & Studienarbeiten:

S. Friedrich, "Adapting an Antineutrino Detector for Muography Applications: First Simulations of Monitoring Spent Fuel Elements". Master-Arbeit (Oktober 2024)

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 2024 erfolgten in rund 121 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 2024 rund 131 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 2024 waren in den hier aufgeführten FuE-Vorhaben 85 Nachwuchswissenschaftlerinnen und Nachwuchswissenschaftler in FuE-Vorhaben eingebunden.

3 Verzeichnis der Forschungsstellen

BGE TECHNOLOGY GmbH, Eschenstraße 55, 31224 Peine

- 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  59
- 02 E 12042A** Verbundprojekt: Erarbeitung einer Methodik zur systematischen Ableitung von zu erwartenden und abweichenden Entwicklungen im Kristallingestein in Deutschland und exemplarische Anwendung als Grundlage zur Bewertung des sicheren Einschlusses unter Berücksichtigung von Optimierungsmaßnahmen (CHRISTA III), Teilpr. A  99
- 02 E 12133A** Verbundprojekt: Weiterführung der Entwicklung von Ausbau von Grubenbauen für ein HAW-Endlager in Tongestein (AGEnT002), Teilprojekt A  132
- 02 E 12214B** Verbundprojekt: Multi-scale experimental and numerical analysis of crushed salt material used as engineered backfill for a nuclear waste repository in rock salt (MEASURES), Teilprojekt B  160
- 02 E 12234B** Verbundprojekt: Bewertung der Integrität von Endlagerbehältern unter Korrosionseinfluss im Kristallingestein (BEnKo), Teilprojekt B  176

Christian-Albrechts-Universität zu Kiel, Christian-Albrecht-Platz 4, 24118 Kiel

- 02 E 11849B** Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt B  185

DMT GmbH & Co. KG, Am TÜV 1, 45307 Essen

- 02 E 12133B** Verbundprojekt: Weiterführung der Entwicklung von Ausbau von Grubenbauen für ein HAW-Endlager in Tongestein (AGEnT002), Teilprojekt B  134

Forschungszentrum Jülich GmbH, Wilhelm-Johnen-Straße, 52428 Jülich

- 02 E 11921A** Verbundprojekt: Untersuchungen zur SEParation von AMeridium aus hochradioaktiven Abfalllösungen (SEPAM), Teilprojekt A  67
- 02 E 12224D** Verbundprojekt: Rückhaltung und Löslichkeit dosisrelevanter Radionuklide unter den reduzierenden Nahfeldbedingungen eines Endlagers im Ton- oder Kristallingestein (RULET), Teilprojekt D  172
- 02 W 6279** Neu- und Weiterentwicklung von Konzepten, Methoden und Techniken für die internationale Kernmaterialüberwachung,  210

insbesondere im Rahmen der nuklearen Entsorgung
(SAFEGUARDS-3)

Freie Universität Berlin, Kaiserwerther Str. 16-18, 14195 Berlin

- 02 E 11849C** Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt C  188

Friedrich-Schiller-Universität Jena, Fürstengraben 1, 07743 Jena

- 02 E 11911B** Verbundprojekt: Vorhersage der heterogenen Radionuklidsorption auf Kluft- und Störungsflächen in granitischen Gesteinen: Parametrisierung und Validierung verbesserter reaktiver Transportmodelle (WTZ-Granit), Teilprojekt B  65
- 02 E 12153A** Verbundprojekt: Erosion von Bentonit unter In-situ Bedingungen durch Einwirkung natürlicher Wässer in geologischen Tiefenlagern (EVIDENT), Teilprojekt A  138

Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Schwertnergasse 1, 50667 Köln

- 02 E 11466** Entwicklung von Rechenmodulen für die integrierte Modellierung von Transportprozessen im einschlusswirksamen Gebirgsbereich (RepoTREND+)  18
- 02 E 11698** Untersuchung thermisch-hydraulisch-mechanisch-chemischer Einwirkungen auf zementbasierte Dichtelemente (THYMECZ)  20
- 02 E 11819** Mineralumwandlung und Sorption bei erhöhten Temperaturen in geklüfteten Kristallingesteinen und Barrierematerial (MUSE)  22
- 02 E 11829** Tonsteinforschung im Felslabor Mont Terri ab Phase 25 (MonTe-25)  24
- 02 E 11870A** Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt A  43
- 02 E 11880** Sicherheitsrelevante Untersuchungen zur Bentonitaufsättigung (SIRUB)  57
- 02 E 11941** Wissenschaftliche Grundlagen zum Nachweis der Langzeitsicherheit von Endlagern (WiGru-9)  74
- 02 E 11981A** Verbundprojekt: Implementierung eines Monitoringsystems zur Evaluierung der Korrosionsvorgänge an Behältermaterialien in Bentonit-basierten Endlagerkonzepten (IMKORB), Teilprojekt A  76
- 02 E 12012A** Verbundprojekt: Weiterentwicklung von d^{3f++}: Hydrogeologische Modellierung im regionalen Maßstab (HYMNE II), Teilprojekt A  88

02 E 12022B	Verbundprojekt: Internationales Benchmarking zur Verifizierung und Validierung von TH ² M-Simulatoren insbesondere im Hinblick auf fluiddynamische Prozesse in Endlagersystemen - Erweiterung auf multiphysikalische Ansätze und mehrdimensionale Modellgeometrien (BenVaSim II), Teilprojekt B	 95
02 E 12032	Methoden zur experimentellen und numerischen Analyse der geologischen Barriere eines Endlagers in tonreichen Sedimentgesteinsformationen (MAGNUS)	 97
02 E 12042B	Verbundprojekt: Erarbeitung einer Methodik zur systematischen Ableitung von zu erwartenden und abweichenden Entwicklungen im Kristallingestein in Deutschland und exemplarische Anwendung als Grundlage zur Bewertung des sicheren Einschlusses unter Berücksichtigung von Optimierungsmaßnahmen (CHRISTA III), Teilpr. B	 101
02 E 12052B	Verbundprojekt: Konkurrenz und Reversibilität bei Sorptionsvorgängen (KuRSiv), Teilprojekt B	 105
02 E 12122A	Verbundprojekt: Stabilität von Mineralphasen des Eisens im Nahfeld eines Endlagers (STAMINA), Teilprojekt A	 128
02 E 12153C	Verbundprojekt: Erosion von Bentonit unter In-situ Bedingungen durch Einwirkung natürlicher Wässer in geologischen Tiefenlagern (EVIDENT), Teilprojekt C	 142
02 E 12163B	Verbundprojekt: Vertikales hydraulisches Dichtsystem nach dem Sandwich-Prinzip - Hauptprojekt Phase 2 (Sandwich-HP2), Teilprojekt B	 146
02 E 12184	Flankierende nationale und internationale Vernetzung für Forschung und Kompetenzerhalt im Bereich Endlagersicherheit (FLANKE)	 153
02 E 12194	Interaktionen zwischen den geotechnischen Barrieren eines Endlagers in tonreichen Sedimentgesteinsformationen - Phase 1 (INTERESE)	 156
02 E 12214A	Verbundprojekt: Multi-scale experimental and numerical analysis of crushed salt material used as engineered backfill for a nuclear waste repository in rock salt (MEASURES), Teilprojekt A	 158
02 E 12234A	Verbundprojekt: Bewertung der Integrität von Endlagerbehältern unter Korrosionseinfluss im Kristallingestein (BEnKo), Teilprojekt A	 174
02 E 12254	Methodisches Vorgehen zur Entwicklung und Validierung von Modellen zur langzeitsicherheitlichen Bewertung von Endlagern für radioaktive Abfälle (DOSIS)	 178

- 02 E 11860B** Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt B  **Fehler! Textmarke nicht definiert.**
- 02 E 11870B** Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt B  45
- 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  63
- 02 E 12052A** Verbundprojekt: Konkurrenz und Reversibilität bei Sorptionsvorgängen (KuRSiv), Teilprojekt A  103
- 02 E 12072B** Verbundprojekt: MgO-Beton C3 als langzeitbeständiges und schnellwirksames Verschlusselement für Schachtverschlüsse zukünftiger HAW-Endlager im Salinar (MgO-C3), Teilprojekt B  118
- 02 E 12112A** Verbundprojekt: Systematic sensitivity analysis for mechanistic geochemical models using field data from crystalline rock (SANGUR), Teilprojekt A  124

Helmholtz-Zentrum Potsdam Deutsches GeoForschungsZentrum GFZ, Telegrafenberg, 14473 Potsdam

- 02 E 12062B** Verbundprojekt: Spannungsprognosen – Quantifizierung und Reduzierung von Ungewissheiten mit geomechanisch-numerischen Untergrundmodellen (SQuaRe), Teilprojekt B: Bayesischer Ansatz zur Kalibrierung geomechanisch-numerischer Modelle mit Reduzierung von Ungewissheiten  112

IfG Institut für Gebirgsmechanik GmbH, Friederikenstr. 60, 04279 Leipzig

- 02 E 12214C** Verbundprojekt: Multi-scale experimental and numerical analysis of crushed salt material used as engineered backfill for a nuclear waste repository in rock salt (MEASURES), Teilprojekt C  162

Johannes Gutenberg-Universität Mainz, Saarstraße 21, 55122 Mainz

- 02 E 11860A** Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt A  26

Johann Wolfgang Goethe-Universität Frankfurt am Main, Senckenberganlage 31, 60325 Frankfurt am Main

- 02 E 12012B** Verbundprojekt: Weiterentwicklung von d^{3f++}: Hydrogeologische Modellierung im regionalen Maßstab (HYMNE II), Teilprojekt B  90

Karlsruher Institut für Technologie (Großforschungsaufgabe), Hermann-von-Helmholtz-Platz 1, 76344 Eggenstein-Leopoldshafen

- | | | |
|--------------------|---|---|
| 02 E 11849D | Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt D |  190 |
| 02 E 11849E | Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt E |  192 |
| 02 E 11860C | Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt C |  30 |
| 02 E 11921B | Verbundprojekt: Untersuchungen zur SEParation von AMericiem aus hochradioaktiven Abfalllösungen (SEPAM), Teilprojekt B |  69 |
| 02 E 11981B | Verbundprojekt: Implementierung eines Monitoringsystems zur Evaluierung der Korrosionsvorgänge an Behältermaterialien in Bentonit-basierten Endlagerkonzepten (IMKORB), Teilprojekt B |  78 |
| 02 E 12052C | Verbundprojekt: Konkurrenz und Reversibilität bei Sorptionsvorgängen (KuRSiv), Teilprojekt C |  107 |
| 02 E 12122B | Verbundprojekt: Stabilität von Mineralphasen des Eisens im Nahfeld eines Endlagers (STAMINA), Teilprojekt B |  130 |
| 02 E 12153B | Verbundprojekt: Erosion von Bentonit unter In-situ Bedingungen durch Einwirkung natürlicher Wässer in geologischen Tiefenlagern (EVIDENT), Teilprojekt B |  140 |
| 02 E 12204 | Formen der Konfliktbearbeitung in der nuklearen Entsorgung (KonE) |  208 |

Karlsruher Institut für Technologie (Universitätsaufgabe), Kaiserstr. 12, 76131 Karlsruhe

- | | | |
|--------------------|---|---|
| 02 E 12001A | Verbundprojekt: Sandwich Support Projekt 1: Heterogene Bentonithydratation (SANDWICH-SP1), Teilprojekt A |  84 |
| 02 E 12163A | Verbundprojekt: Vertikales hydraulisches Dichtsystem nach dem Sandwich-Prinzip - Hauptprojekt Phase 2 (Sandwich-HP2), Teilprojekt A |  144 |

Leibniz Universität Hannover, Welfengarten 1, 30167 Hannover

- | | | |
|--------------------|--|---|
| 02 E 11849F | Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt F |  196 |
| 02 E 11870E | Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt E |  53 |

02 E 11870F Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt F  55

02 E 11981C Verbundprojekt: Implementierung eines Monitoringsystems zur Evaluierung der Korrosionsvorgänge an Behältermaterialien in Bentonit-basierten Endlagerkonzepten (IMKORB), Teilprojekt C  80

Öko-Institut. Institut für angewandte Ökologie e. V., Merzhauser Str. 173, 79100 Freiburg

02 E 11849G Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt G  200

Rheinisch-Westfälische Technische Hochschule Aachen, Templergraben 55, 52062 Aachen

02 E 11931 Einfluss der thermischen Reife auf die gekoppelten hydro-mechanischen Eigenschaften niedrig-durchlässiger Tonsteine – Feld & Laborskala (Maturity)  71

02 E 12062C Verbundprojekt: Spannungsprognosen – Quantifizierung und Reduzierung von Ungewissheiten mit geomechanisch-numerischen Untergrundmodellen (SQuaRe), Teilprojekt C: Ungewissheiten durch geometrische Parameter, Erstellung von Ersatzmodellen durch Methoden der künstlichen Intelligenz  114

02 W 6281 Antineutrino-Detektion zur Überwachung radioaktiver Abfälle (NU-SAFEGUARDS)  212

Ruhr-Universität Bochum, Universitätsstr. 150, 44801 Bochum

02 E 12001B Verbundprojekt: Sandwich Support Projekt 1: Heterogene Bentonithydratation (SANDWICH-SP1), Teilprojekt B  86

Technische Universität Bergakademie Freiberg, Akademiestraße 6, 09599 Freiberg

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  61

02 E 12072A Verbundprojekt: MgO-Beton C3 als langzeitbeständiges und schnellwirksames Verschlusselement für Schachtverschlüsse zukünftiger HAW-Endlager im Salinar (MgO-C3), Teilprojekt A  116

02 E 12143 Feinerkundung der Steinsalzkontur im Bereich zukünftiger Verschlussbauwerke in HAW-Endlagern durch in situ Raman-Spektroskopie (SaRa)  136

- 02 E 12163C** Verbundprojekt: Vertikales hydraulisches Dichtsystem nach dem Sandwich-Prinzip - Hauptprojekt Phase 2 (Sandwich-HP2), Teilprojekt C  148
- 02 E 12173** Entwicklung eines salzgrusbasierten Versatzkonzepts unter der Option Rückholbarkeit - Phase 2 (SAVER II)  150

Technische Universität Berlin, Straße des 17. Juni 135, 10623 Berlin

- 02 E 11849H** Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt H  202

Technische Universität Carolo-Wilhelmina zu Braunschweig, Pockelsstr. 14, 38106 Braunschweig

- 02 E 11849I** Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt I  204
- 02 E 12102** Entwicklung einer selbstlernenden Modellierungsmethodik zu geomechanischen und geotechnischen Prozessen am Beispiel der Planungs- und Auffahrungsphase einer Einlagerungsstrecke eines Tiefenlagers (SEMOTI)  122

Technische Universität Clausthal, Adolph-Römer-Straße 2A, 38678 Clausthal-Zellerfeld

- 02 E 11849A** Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt A  181
- 02 E 11991** Entwicklung und Validation einer neuartigen Versuchstechnik für triaxiale Kriechversuche bei geringer deviatorischer Belastung (KRIECHTECH)  82
- 02 E 12022A** Verbundprojekt: Internationales Benchmarking zur Verifizierung und Validierung von TH²M-Simulatoren insbesondere im Hinblick auf fluiddynamische Prozesse in Endlagersystemen - Erweiterung auf multiphysikalische Ansätze und mehrdimensionale Modellgeometrien (BenVaSim II), Teilprojekt A  93
- 02 E 12082** Langzeitsicheres Abdichtungselement aus Salzschnittblöcken - Durchführung, Auswertung und Reanalyse von THM-Versuchen unter triaxialer Extensionsbeanspruchung (SSBVIER)  120
- 02 E 12112B** Verbundprojekt: Systematic sensitivity analysis for mechanistic geochemical models using field data from crystalline rock (SANGUR), Teilprojekt B  126
- 02 E 12214D** Verbundprojekt: Multi-scale experimental and numerical analysis of crushed salt material used as engineered backfill for a nuclear waste repository in rock salt (MEASURES), Teilprojekt D  164

Technische Universität Darmstadt, Karolinenplatz 5, 64289 Darmstadt

- 02 E 12062A** Verbundprojekt: Spannungsprognosen – Quantifizierung und Reduzierung von Ungewissheiten mit geomechanisch-numerischen Untergrundmodellen (SQuaRe), Teilprojekt A: Ungewissheiten durch Materialparameter, Diskretisierung, Initial- und Randbedingungen  110

Technische Universität Dresden, Helmholtzstr. 10, 01069 Dresden

- 02 E 11860G** Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt G  39

Technische Universität München, Arcisstraße 21, 80333 München

- 02 E 11860E** Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt E  35

- 02 E 11870D** Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt D  51

Universität des Saarlandes, Campus, 66123 Saarland

- 02 E 11860D** Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt D  32

Universität Greifswald, Domstr. 11, 17489 Greifswald

- 02 E 11870C** Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt C  48

Universität Heidelberg, Grabengasse 1, 69117 Heidelberg

- 02 E 11860H** Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt H  41

Universität Kassel, Mönchebergstr. 19, 34125 Kassel

- 02 E 11849J** Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt J  206

Universität Potsdam, Am Neuen Palais 10, 14469 Potsdam

- 02 E 11860F** Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt F  37