

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

PTE-E Nr. 69

BMUKN geförderte FuE-Vorhaben zur
„Endlagerung radioaktiver Abfälle“

Berichtszeitraum: 01. Januar – 30. Juni 2025

Projektträger Karlsruhe (PTKA)
Nukleare Sicherheitsforschung

September 2025

PTE-Berichte

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

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 Forschung, Technologie und Raumfahrt (BMFTR) und des Bundesministeriums für Umwelt, Klimaschutz, Naturschutz und nukleare Sicherheit (BMUKN) 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 BMUKN (früher BMWi, BMWK, dann BMUV¹) 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 BMUKN 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	7
D	Querschnittsaufgaben	11
D1	Wissens- und Kompetenzmanagement	11
D2	Sozio-technische Fragestellungen	12
D3	Kernmaterialüberwachung	13
2	Formalisierte Zwischenberichte	14
2.1	Vorhaben Bereich C1 – C3	14
2.2	Vorhaben Bereich D1 – D3	153
	Information zu Publikationen sowie zu Aus- und Weiterbildung	171
3	Verzeichnis der Forschungsstellen	172

1 Verzeichnis der Vorhaben gemäß FuE-Bereichen

C Forschungsgebiet Endlagerung

C1 Standortauswahl

02 E 11829	Tonsteinforschung im Felslabor Mont Terri (MonTe)	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln	 15
02 E 11931	Einfluss der thermischen Reife auf die gekoppelten hydro-mechanischen Eigenschaften niedrig-durchlässiger Tonsteine – Feld & Laborskala (Maturity)	Rheinisch-Westfälische Technische Hochschule Aachen	 43
02 E 12052A	Verbundprojekt: Konkurrenz und Reversibilität bei Sorptionsvorgängen (KuRSiv), Teilprojekt A	Helmholtz-Zentrum Dresden - Rossendorf e. V.	 70
02 E 12052B	Verbundprojekt: Konkurrenz und Reversibilität bei Sorptionsvorgängen (KuRSiv), Teilprojekt B	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH	 72
02 E 12052C	Verbundprojekt: Konkurrenz und Reversibilität bei Sorptionsvorgängen (KuRSiv), Teilprojekt C	Karlsruher Institut für Technologie (Großforschungsaufgabe), Eggenstein-Leopoldshafen	 74
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	 76
02 E 12062B	Verbundprojekt: Spannungsprognosen – Quantifizierung und Reduzierung von Ungewissheiten mit geomechanisch-numerischen Untergrundmodellen (SQuaRe), Teilprojekt B: Bayesischer Ansatz zur Kalibrierung	Helmholtz-Zentrum Potsdam Deutsches GeoForschungsZentrum GFZ	 79

	geomechanisch-numerischer Modelle mit Reduzierung von Ungewissheiten		
02 E 12062C	Verbundprojekt: Spannungsprognosen – Quantifizierung und Reduzierung von Ungewissheiten mit geomechanisch-numerischen Untergrundmodellen (SQuaRe), Teilprojekt C: Ungewissheiten durch geometrische Parameter, Erstellung von Ersatzmodellen durch Methoden der künstlichen Intelligenz	Rheinisch-Westfälische Technische Hochschule Aachen	 82

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

02 E 11870A	Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt A	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln	 25
02 E 11870B	Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt B	Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e. V., Dresden	 27
02 E 11870C	Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt C	Universität Greifswald	 29
02 E 11870D	Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt D	TU München	 31
02 E 11870E	Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt E	Leibniz Universität Hannover	 33
02 E 11870F	Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt F	Leibniz Universität Hannover	 35
02 E 11880	Sicherheitsrelevante Untersuchungen zur Bentonitaufsättigung (SIRUB)	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln	 37
02 E 12001A	Verbundprojekt: Sandwich Support Projekt 1: Heterogene Bentonithydratation (SANDWICH-SP1), Teilprojekt A	Karlsruher Institut für Technologie (Universitätsaufgabe)	 51
02 E 12001B	Verbundprojekt: Sandwich Support Projekt 1: Heterogene Bentonithydratation (SANDWICH-SP1), Teilprojekt B	Ruhr-Universität Bochum	 53
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	 84

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	 86
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	 90
02 E 12122A	Verbundprojekt: Stabilität von Mineralphasen des Eisens im Nahfeld eines Endlagers (STAMINA), Teilprojekt A	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH	 97
02 E12122B	Verbundprojekt: Stabilität von Mineralphasen des Eisens im Nahfeld eines Endlagers (STAMINA), Teilprojekt B	Karlsruher Institut für Technologie (Großforschungsaufgabe) Eggenstein-Leopoldshafen	 99
02 E 12133A	Verbundprojekt: Weiterführung der Entwicklung von Ausbau von Grubenbauen für ein HAW-Endlager in Tongestein (AGEnT002), Teilprojekt A	BGE TECHNOLOGY GmbH	 101
02 E 12133B	Verbundprojekt: Weiterführung der Entwicklung von Ausbau von Grubenbauen für ein HAW-Endlager in Tongestein (AGEnT002), Teilprojekt B	DMT GmbH & Co. KG	 103
02 E 12143	Feinerkundung der Steinsalzkontur im Bereich zukünftiger Verschlussbauwerke in HAW-Endlagern durch in situ Raman-Spektroskopie (SaRa)	Technische Universität Bergakademie Freiberg	 105
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	 107

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	 109
02 E 12153C	Verbundprojekt: Erosion von Bentonit unter In-situ Bedingungen durch Einwirkung natürlicher Wässer in geologischen Tiefenlagern (EVIDENT), Teilprojekt C	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH	 111
02 E 12163A	Verbundprojekt: Vertikales hydraulisches Dichtsystem nach dem Sandwich-Prinzip - Hauptprojekt Phase 2 (Sandwich-HP2), Teilprojekt A	Karlsruher Institut für Technologie (Universitätsaufgabe)	 113
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	 115
02 E 12163C	Verbundprojekt: Vertikales hydraulisches Dichtsystem nach dem Sandwich-Prinzip - Hauptprojekt Phase 2 (Sandwich-HP2), Teilprojekt C	Technische Universität Bergakademie Freiberg	 117
02 E 12173	Entwicklung eines salzgrusbasierten Versatzkonzepts unter der Option Rückholbarkeit - Phase 2 (SAVER II)	Technische Universität Bergakademie Freiberg	 119
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	 124
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	 113
02 E 12214C	Verbundprojekt: Multi-scale experimental and numerical analysis of crushed salt material	IfG Institut für Gebirgsmechanik GmbH	 128

	used as engineered backfill for a nuclear waste repository in rock salt (MEASURES), Teilprojekt C		
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	 130
02 E 12234A	Verbundprojekt: Bewertung der Integrität von Endlagerbehältern unter Korrosionseinfluss im Kristallingestein (BEnKo), Teilprojekt A	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH	 141
02 E 12234B	Verbundprojekt: Bewertung der Integrität von Endlagerbehältern unter Korrosionseinfluss im Kristallingestein (BEnKo), Teilprojekt B	BGE TECHNOLOGY GmbH	 143

C3 Sicherheitsnachweis

02 E 11860D	Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt D	Universität des Saarlandes	 17
02 E 11860E	Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt E	TU München	 19
02 E 11860F	Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt F	Universität Potsdam	 21
02 E 11860H	Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt H	Universität Heidelberg	 23
02 E 11890A	Verbundprojekt: Entwicklung und Test eines erweiterten Hoek-Brown Stoffmodells zur Berücksichtigung anisotropen Festigkeitsverhaltens bei der Anwendung der Integritätskriterien für kristalline Wirtsgesteine (BARIK), Teilprojekt A	BGE Technology GmbH, Peine	 39
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	 41
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	 45
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	 47
02 E 11981C	Verbundprojekt: Implementierung eines Monitoringsystems zur	Leibniz Universität Hannover	 49

	Evaluierung der Korrosionsvorgänge an Behältermaterialien in Bentonit-basierten Endlagerkonzepten (IMKORB), Teilprojekt C		
02 E 12012A	Verbundprojekt: Weiterentwicklung von d ³ f++: Hydrogeologische Modellierung im regionalen Maßstab (HYMNE II), Teilprojekt A	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH	 55
02 E 12012B	Verbundprojekt: Weiterentwicklung von d ³ f++: Hydrogeologische Modellierung im regionalen Maßstab (HYMNE II), Teilprojekt B	Johann Wolfgang Goethe-Universität Frankfurt am Main	 57
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	 60
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	 62
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	 64
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	 66

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	 68
02 E 12082	Langzeitsicheres Abdichtungselement aus Salzschnittblöcken - Durchführung, Auswertung und Reanalyse von THM-Versuchen unter triaxialer Extensionsbeanspruchung (SSBVIER)	Technische Universität Clausthal	 88
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.	 93
02 E 12112B	Verbundprojekt: Systematic sensitivity analysis for mechanistic geochemical models using field data from crystalline rock (SANGUR), Teilprojekt B	Technische Universität Clausthal	 95
02 E 12194	Interaktionen zwischen den geotechnischen Barrieren eines Endlagers in tonreichen Sedimentgesteinsformationen - Phase 1 (INTERESE)	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH	 122
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	 133
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.	 135
02 E 12224C	Verbundprojekt: Rückhaltung und Löslichkeit dosisrelevanter	Karlsruher Institut für Technologie	 137

	Radionuklide unter den reduzierenden Nahfeldbedingungen eines Endlagers im Ton- oder Kristallingestein (RULET), Teilprojekt C	(Großforschungsaufgabe) Eggenstein-Leopoldshafen	
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	 139
02 E 12244A	Verbundprojekt: KI-unterstützte Stoffmodellierung am Beispiel von Bentonit (KI-Stoff), Teilprojekt A	BGE TECHNOLOGY GmbH	 145
02 E 12244B	Verbundprojekt: KI-unterstützte Stoffmodellierung am Beispiel von Bentonit (KI-Stoff), Teilprojekt B	Technische Universität Bergakademie Freiberg	 147
02 E 12244C	Verbundprojekt: KI-unterstützte Stoffmodellierung am Beispiel von Bentonit (KI-Stoff), Teilprojekt C	Technische Universität Braunschweig	 149
02 E 12254	Methodisches Vorgehen zur Entwicklung und Validierung von Modellen zur langzeitsicherheitlichen Bewertung von Endlagern für radioaktive Abfälle (DOSIS)	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH	 151

D Querschnittsaufgaben

D1 Wissens- und Kompetenzmanagement

D2 Sozio-technische Fragestellungen

02 E 11849C	Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt C	Freie Universität Berlin	 154
02 E 11849D	Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt D	Karlsruher Institut für Technologie (Großforschungsaufgabe), Eggenstein- Leopoldshafen	 156
02 E 11849E	Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt E	Karlsruher Institut für Technologie (Großforschungsaufgabe), Eggenstein- Leopoldshafen	 158
02 E 11849G	Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt G	Öko-Institut. Institut für angewandte Ökologie e. V.	 160
02 E 11849J	Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt J	Universität Kassel	 162
02 E 12204	Formen der Konfliktbearbeitung in der nuklearen Entsorgung (KonE)	Karlsruher Institut für Technologie (Großforschungsaufgabe) Eggenstein- Leopoldshafen	 164

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	 166
02 W 6281	Antineutrino-Detektion zur Überwachung radioaktiver Abfälle (NU-SAFEGUARDS)	Rheinisch-Westfälische Technische Hochschule Aachen	 168

2 Formalisierte Zwischenberichte

2.1 Vorhaben Bereich C1 – C3

Antragssteller(in) / ausführende Stelle: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 11829
Vorhaben (Thema/Titel): Tonforschung im Felslabor Mont Terri (MonTe)		
Themenbereich des Fördervorhabens: 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: 01.01.2025 bis 30.06.2025
Gesamtkosten des Vorhabens: 2.334.940,00 EUR		Projektleitung: 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. Anlässlich des Technical Meeting TM-42 wurden aktuelle Ergebnisse präsentiert.

AP2: Am 22. Januar 2025 hat das jährliche HE-E Partnermeeting stattgefunden. Es wurde 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. Derzeit wird ein Dokument (Stand 23.07.2025) zwischen den Partnern zirkuliert, dass Vor- und Nachteile der Aufheizung auf 300°C diskutiert.

AP3: Die Messungen wurden auch im Berichtszeitraum fortgeführt. Mit dem Betreiber des Untertagelabors Swisstopo wurden bereits erste Gespräche geführt, um eine kontinuierliche Datenaufnahme zu gewährleisten. Nach Fertigstellung von MONTEIS sollen diese Daten in das vom Mont Terri Konsortium entwickelte System übernommen werden. Anlässlich des Technical Meeting TM-42 wurden aktuelle Ergebnisse präsentiert.

AP9: Im JB 2024 wurde davon berichtet, dass bei dem Anschluss der elektrischen Druckaufnehmer der neu installierten Minipiezometer an die Datenaufnahme Schwierigkeiten aufgetreten sind. Die Schwierigkeiten konnten nach mehrfacher Rücksprache mit den Verantwortlichen von Swisstopo sowie der mit der Datenaufnahme betrauten Firma im 1.Hj.2025 beseitigt werden konnten. Sämtliche Daten sind vorhanden und gesichert. Nach Fertigstellung von MONTEIS sollen diese Daten in das vom Mont Terri Konsortium entwickelte System übernommen werden. Anlässlich des Technical Meeting TM-42 wurden aktuelle Ergebnisse präsentiert

AP10: Teilnahme am TM-42 am 13./14.05.2025 sowie an den SM-97 am 13.03.2025 und am außerordentlichen SM am 05.06.2025.

4. Geplante Weiterarbeiten

Fortführung der Porendruck- und Temperaturmessungen, Identifizierung aussagekräftiger Messsensoren für zur Vorbereitung des Arbeitsplans für die kommende Phase 31, Teilnahme an Steering Meetings und VK zu den einzelnen APs.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Beiträge zum TM-42, 13./14.05.2025, Porrentruy:

- FE Experiment: Insights into 10 years of heating
- CD-A twin niches after 5 years: Measured differences in HM parameters
- RI-Experiment – the whispering gallery
- Working Group 2: New innovative technologies and sensor developments (GRS lead)

Antragssteller(in) / ausführende Stelle: Universität des Saarlandes, Anorganische Festkörperchemie, Postfach 15 11 50, 66041 Saarbrücken		Förderkennzeichen: 02 E 11860D
Vorhaben (Thema/Titel): Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt D		
Themenbereich des Fördervorhabens: 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: 01.01.2025 bis 30.06.2025
Gesamtkosten des Vorhabens: 656.091,50 EUR		Projektleitung: Prof. Dr. Ralf Kautenburger

1. Vorhabensziele / Bezug zu 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). 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 wurde im Projekt die Kopplung einer Laserablation mit ICP-MS implementiert, 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 das Retentionsverhalten eines neuen Waste-Cocktails (WC), bestehend aus Se(IV), Mo(VI), Pd(II), Cs(I), Eu(III), Re(VII), Th(IV) und U(VI), an Ca-Bentonit (Calcigel) mit und ohne den Einfluss von Fe(0/II/III) untersucht. Alle Untersuchungen wurden zusätzlich durch geochemische Modellierung mittels PHREEQC gestützt bzw. die erhaltenen Ergebnisse dazu genutzt das Verständnis der Ausfällung und der Adsorption über die modellierten Speziationen besser nachzuvollziehen.

Zuerst wurden Fällungsstudien der WC-Elemente im Einzelementexperiment (SE) und im WC (Konkurrenz/Wechselwirkung aller WC-Elemente) in 0,1 M NaCl und verdünnter Gipshuttlösung (VGL) bei pH = 8 und 11 durchgeführt. Es zeigte sich, dass Se(IV), Mo(VI), Cs(I) und Re(VII) bei den meisten untersuchten Bedingungen weitgehend in Lösung bleiben. Pd(II), Eu(III), Th(IV) und U(VI) fielen in erheblichem Maße aus, wobei hier deutliche Einflüsse der Ionenstärke und der Konkurrenz durch andere WC-Elemente zu beobachten waren. Eu(III) und Th(IV) zeigten unter allen Bedingungen einen annähernd quantitativen Rückhalt. Alle Ergebnisse stimmten mit den thermodynamischen Vorhersagen überein.

Im ternären System mit Calcigel wurden analog zum binären System SE- und WC-Experimente in 0,1 M NaCl Lösung und VGL sowie bei pH = 8 und 11 durchgeführt. Dabei wurden Eu(III), Re(IV) und Th(IV) ähnliche bis gleiche Retentionen wie im binären System beobachtet. Cs(I) zeigte nun in der geringen Ionenstärke einen beträchtlichen Rückhalt von ca. 70%, welcher allerdings in der VGL auf ca. 20% sank. Bei U(VI) konnte ein deutlicher Einfluss des pH-Wertes beobachtet werden. So wurde bei pH = 8 ein Rückhalt von max. 50% und bei pH = 11 von max. 97% festgestellt. Ähnliches gilt für den Rückhalt von Se(IV): Hier wurden bei pH = 8 max. 45% und bei pH = 11 max. 17% zurückgehalten. Im Fall von Mo(VI) zeigten sich deutliche Einflüsse von Konkurrenz. So wurde der höchste Rückhalt bei pH = 8 in der 0,1 M NaCl-Lösung im SE-Experiment beobachtet (ca. 30%). Dieser wurde im WC-Experiment aber schon mehr als halbiert und bei der hohen Ionenstärke und/oder bei pH = 11 konnte praktisch keine Retention mehr beobachtet werden. Für Pd(II) wurde eine starke Adsorptionskante beobachtet, die insbesondere in VGL stärker ausgeprägt war als die Ausfällungseffekte. Die experimentellen Ergebnisse (SE) für Cs(I), Eu(III), Th(IV) und U(VI) stimmten weitgehend mit etablierten Adsorptionsmodellen aus der Literatur überein.

Im quaternären System hatte die Einführung von nZVI (nano Zero Valent Iron) einen erheblichen Effekt auf das Verhalten mehrerer Elemente. Bei Se(IV) und Re(VII) führte die Anwesenheit von nZVI zu einer teilweise verstärkten Immobilisierung, die häufig auf die Reduktion zu weniger löslichen Spezies zurückgeführt wurde. Insbesondere wurde gezeigt, dass die Immobilisierung von Re(VII) in erster Linie durch reduktive Wechselwirkungen mit Eisen bedingt ist. Der Einfluss auf Mo(VI) konnte aufgrund der Auslaugung von Mo(VI) aus dem nZVI selbst nicht nachvollzogen werden. Die anderen Elemente, einschließlich Pd(II), Cs(I), Eu(III), Th(IV) und U(VI), verhielten sich in der 0,1 M NaCl-Lösung ähnlich wie im ternären System, zeigten aber in den VGL-Experimenten ein unerwartetes Verhalten, das weitere Untersuchungen rechtfertigt.

Parallel zu den anderen Arbeiten wurde eine fortschrittliche Transient-Messmethode für das Agilent 8900 ICP-QQQ erfolgreich adaptiert bzw. optimiert. Während die Nachweis- und Quantifizierungsgrenzen nur geringfügige Verbesserungen aufwiesen, wurde die Methode durch die vollständige Automatisierung zeitsparender und benutzerfreundlicher. Diese robuste Methode wurde für alle Messungen in hochsalinaren Matrices im Rahmen der oben beschriebenen Studien angewandt und lieferte reproduzierbare Ergebnisse.

4. Geplante Weiterarbeiten

In der restlichen Projektlaufzeit werden noch letzte Laborarbeiten abgeschlossen und mit der Erstellung des Abschlussberichtes begonnen.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Langer O.J.J. (2025) Investigations on the behavior of repository-relevant elements on calcium bentonite under different conditions. Masterarbeit, Naturwissenschaftlich-Technischen Fakultät, Universität des Saarlandes.

Antragssteller(in) / ausführende Stelle: Technische Universität München		Förderkennzeichen: 02 E 11860E
Vorhaben (Thema/Titel): Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt E		
Themenbereich des Fördervorhabens: 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 31.03.2025		Berichtszeitraum: 01.01.2025 bis 31.03.2025
Gesamtkosten des Vorhabens: 691.168,00 EUR		Projektleitung: Dr. S. Krüger

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Vorhabensziele:

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

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

Das Untersuchungsprogramm umfasst folgende Arbeitspakete (AP):

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

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

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

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

Modellierungen zur Sorption von Th(IV) im Vergleich zu U(IV) in CSH für C/S = 1 wurden mit der Suche nach Komplexen mit verschiedenen Zahlen von Hydroxoliganden am gleichen Sorptionsplatz ohne weitere Ergebnisse abgeschlossen (AP 1.4).

Rechnungen zur Cm(III)-Sorption in CSH zur Unterstützung eines EXAFS-Experiments eines Projektpartners wurden weitgehend abgeschlossen (AP 3). 12 verschiedene Plätze in der Zwischenschicht sowie die beiden Plätze in der CaO-Schicht wurden charakterisiert. Es ergaben sich Sorptionskomplexe in der Zwischenschicht mit 1-4 Hydroxoliganden und Koordinationszahlen von 4-7. Der Einbau in die CaO-Schicht ist auf beiden Plätzen nahezu entartet. Bevorzugt sind schichtverbrückende Spezies sowie der Einbau in die CaO-Schicht mit Energieunterschieden < 30 kJ/mol. Im Gegensatz zu An(IV) zeigen sich für Cm(III) der Einbau in die CaO-Schicht und Plätze in der Zwischenschicht als nahezu entartet. Gemessene Strukturen für Eu, Nd und Am lassen sich größtenteils mit dem Einbau von Cm in die CaO-Schicht erklären, schließen jedoch andere stabile Sorptionskomplexe nicht aus. Weitere Auswertungen im Vergleich mit dem Experiment werden noch durchgeführt.

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), der im Vergleich zu 14 Å-Tobermorit eine engere Zwischenschicht mit der Möglichkeit kürzerer Fe-Ca-Abstände bietet. Die Adsorption in der Zwischenschicht als auch Einbau in die CaO-Schicht erwiesen sich wie bei 14 Å-Tobermorit als relativ stabil. Für alle Plätze wurden Abstände Fe-Si $<$ Fe-Ca berechnet, im Gegensatz zum Experiment. Entsprechend der engeren Zwischenschicht fehlen schichtverbrückende und monodentate Plätze, während die Plätze zwischen den Silikatketten einer Mineralschicht günstiger als für 14 Å-Tobermorit sind. Rechnungen zur Adsorption von Fe(II) an der (001)-Oberfläche von Tobermorit (AP 1.5) wurden mit einem einschichtigen, wasserbedeckten Modell aufgenommen. Kurze Äquilibrierungszeiten im Experiment legen die Adsorption auf Oberflächen neben der Absorption nahe, was zum Unterschied zwischen bisherigen Strukturberechnungen und Experiment beitragen kann. Bisherige Ergebnisse zu Sorptionskomplexen an verbrückenden SiO₄-Einheiten zeigen diese als relativ stabil wie in der Zwischenschicht. Im Gegensatz zu bisherigen Befunden wurde ein Komplex mit je einem Abstand Fe-Si = Fe-Ca gefunden, der den experimentellen Befunden näherkommt. Begrenzungen des Modells lassen tiefer in der Oberfläche liegende Sorptionsplätze als ungünstiger erscheinen. Ein Vergleich mit Absorptionsenergien deutet eine bevorzugte Sorption an der Oberfläche an. Diese Arbeiten werden weiterverfolgt.

Der Vergleich verschiedener An/Ln-Mono-Orthosilikatkomplexe mit dem Experiment (PSI-Nagra) (AP 2.1) wurde fortgesetzt und um Cm(III) und U(IV) ergänzt. Die bisher abweichend von Rechnungen in gemessenen Daten vorhandene Ähnlichkeit der Komplexierungsstärke für Np(V) mit Aktinidenkomplexen anderer Oxidationsstufen konnte in der Literatur auf unzureichend berücksichtigten Einfluss der Ionenstärke im Experiment zurückgeführt werden. Die derzeitigen Ergebnisse folgen dem bekannten Trend $An(V) < An(VI) \approx An/Ln(III) < An(IV)$ in Übereinstimmung mit dem Experiment. Bei der Variation der Komplexierungsstärke entlang der Aktiniden- bzw. Lanthanidenreihe bestehen noch Unsicherheiten. Bisherige Ergebnisse legen einen Anstieg mit sinkendem Ionenradius für An(VI) und An/Ln(III) nahe. Gemessene Daten zeigen zwischen U(VI) und Np(VI) einen abweichenden Trend und für An/Ln(III) keinen Unterschied. Berechnete relativ niedrige Koordinationszahlen für Am(III) im Vergleich mit Cm(III) und Eu(III) erscheinen fraglich. Damit können trotz einzelner offener Fragen wesentliche Trends der Silikatkomplexierung von Aktiniden bestätigt und ergänzt werden.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP: 1.5 Sorption und Konkurrenz Fe. AP 3: Unterstützung Experimente.

5. Berichte, Veröffentlichungen

S. Zenker, J. Lohmann, I. Chiorescu, S. Krüger, M. U. Kumke, T. Reich, K. Schmeide, J. Kretzschmar, Complexation of Ln(III) Ions by Gluconate: Joint Investigation Applying TRLFS, CE-ICP-MS, NMR, and DF Calculations, *Inorganic Chemistry* 64 (2025) 7970.

Antragssteller(in) / ausführende Stelle: Universität Potsdam (Physikalische Chemie), Am Neuen Palais 10, 14469 Potsdam		Förderkennzeichen: 02 E 11860F
Vorhaben (Thema/Titel): Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen – Phase II (GRaZ II) – Teilprojekt F: Universität Potsdam		
Themenbereich des Fördervorhabens: 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: 01.01.2025 bis 30.06.2025
Gesamtkosten des Vorhabens: 546.703,00 EUR		Projektleitung: 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 Ligandsystemen

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

Arbeiten zur Wechselwirkung von Eu(III) (Analogon für Am(III), Cm(III)) mit C-S-H-Phasen unter Variation des C/S-Verhältnisses wurden fortgeführt. Bei den experimentellen Untersuchungen handelt es sich um Langzeit-Sorptionsexperimente, in denen in regelmäßigen Intervallen TRLFS-Daten erhoben wurden und diese dann zu vorhanden ergänzt wurden. Entsprechend wurden die Speziationsanalysen mit den neuen Daten aktualisiert. Die Experimente mit Porenwässern, deren Chemie entsprechend unterschiedlichen C-S-H-Phasen über Gehalt an NaCl, CaCl₂, Kieselsäure für den pH-Bereich $9.7 < \text{pH} < 12$ eingestellt wurden, sind fortgeführt worden. Es wurde in den Proben die Ca- bzw. Si-Konzentration variiert. Es zeigte sich, dass vor allem die Si-Konzentration einen starken Einfluss auf die Mischphasenbildung hat. Die Zugabe von NTA zeigte keinen Einfluss auf die Ausbildung der Mischphase(n) weder mit Hinblick auf eine Auflösung derselben noch führte es zu einer veränderten Zusammensetzung der bereits ausgefällten Ca/Si/Eu-Mischphase mit Hinblick auf die Eu-Speziation in dieser (basierend auf den Lumineszenzdaten).

Uranyl wurde mittels zeitaufgelöster Absorptionsspektroskopie (TAS, Flash) in Kombination mit (Kryo)-TRLFS untersucht. Im Mittelpunkt der Untersuchungen standen dabei die U(VI)-Hydrolyse, mehrkernige Komplexe sowie die Bildung von Uranyl-„Organik“-Komplexen (niedermolekulare organische Verbindungen, wie sie in der Zementumgebung, entstammend aus Zementmodifiern, vorliegen können). Die Untersuchungen mittels Transienten-Absorptionsspektroskopie ermöglichten auch Speziationsuntersuchungen von nicht lumineszierenden Komplexen. Neben den Komplexen mit organischen Liganden, wurden vor allem mehrkernige Uranyl-Komplexe untersucht. Gemeinsam mit den Kolleg:innen der TU Dresden und des HZDR ist ein Manuskript zur Komplexierung von U(VI) mit PBTC erstellt worden und aktuell im internen Review-Prozess. Es wird unter der Federführung der TU Dresden zeitnah eingereicht werden. Die experimentellen Arbeiten zur Uranyl-Speziation mittels Transienten-Absorptionsspektroskopie sind damit abgeschlossen.

4. Geplante Weiterarbeiten

Bei den experimentellen Untersuchungen zur Sorptionswechselwirkung von Eu(III) mit C-S-H-Phasen handelt es sich um Langzeit-Sorptionsexperimente, in denen in regelmäßigen Intervallen weiter TRLFS-Daten erhoben werden und diese dann in der Sorptionsspeziation ergänzt werden. Die Auswertung der Sorptionsexperimente mit dem kommerziellen C-S-H-Material Circosil (C/S $\approx$ 0.8) wird abgeschlossen. Die Arbeiten zur Sorption sind fortlaufend und werden bis Projektende fortgesetzt. Gleiches gilt für die Experimente in/mit künstlichen Porenwässern, bei diesen werden weitere pH-Werte zwischen pH 10 und 12 ergänzt und die Bildung der Ca/Si/Eu-Mischphase als Konkurrenz zu Bildung anderer Festphasen untersucht. In den Speziationsanalysen der C-S-H-Phasen wird Bildung einer Ca/Si/Eu-Mischphase für alte Datensätze ergänzt, d.h. die TRLFS-Daten der Langzeit-Sorptionsexperimente müssen bzgl. der Speziation mittels PARAFAC mit neuen Startparametern nochmals analysiert werden. Zu den Ergebnissen der Ca/Si/Eu-Mischphasenbildung wird ein Manuskript erstellt werden. Ein weiteres Manuskript wird zur grundlegenden Analyse der TRLFS-Daten von Eu-Hydroxid-Spezies verfasst. Von beiden liegen erste Rohfassungen vor. Bei der Untersuchung von binären Eu(III)-Ligand-Systemen werden noch Untersuchungen mit Zitrat bei hohen pH-Werten > 9 durchgeführt werden, wobei zusätzlich der Einfluss von Ca(II)-Ionen auf die Komplexbildung erfasst werden soll. Im Themenkomplex der Uranyl-Speziation wird die Auswertung der mehr-dimensionalen Daten abgeschlossen.

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“; Inorganic Chemistry 64 (2025) 7970-7987.

Antragssteller(in) / ausführende Stelle: Universität Heidelberg		Förderkennzeichen: 02 E 11860H
Vorhaben (Thema/Titel): Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen (GRaZ II); Teilprojekt H: Spektroskopische Speziation von Ln-/An-Komplexen mit silicatischen und (zement)organischen Liganden		
Themenbereich des Fördervorhabens: C2.3 Geotechnische und technische Barrieren		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2020 bis 31.12.2025		Berichtszeitraum: 01.01.2025 bis 30.06.2025
Gesamtkosten des Vorhabens: 403.292,00 EUR		Projektleitung: 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 2.2 wurde mittels zeitaufgelöster Laserfluoreszenzspektroskopie (TRLFS) die Speziation von Cm(III) und Eu(III) mit dem Polycarboxylat-Superplasticizer 52IPEG4.5 bei $\text{pH}_m = 5.1$ und den Ionenstärken $I_m(\text{NaCl}) = 0.10 - 2.50 \text{ mol/kg}$ untersucht. Es wurden Titrationsreihen durchgeführt, bei denen die 52IPEG4.5-Konzentration sukzessiv erhöht wurde. Hierbei wurde der pH_m -Wert für jeden Titrationsschritt konstant gehalten. Der Eu(III)-52IPEG4.5-Komplex wurde bereits im Rahmen des GRaZ Projekts bei niedriger Ionenstärke ($I_m(\text{NaCl}) = 0.10 \text{ mol/kg}$) untersucht und ist literaturbekannt. Hierbei wurde mithilfe des Ladungsneutralitätsmodells eine Stabilitätskonstante von $\log \beta = 6.54 \pm 0.1$ ermittelt. Im Rahmen dieser Arbeiten wurden nun erstmals Untersuchungen bei erhöhten Ionenstärken durchgeführt. Der hierbei erhaltene Wert für den Eu(III)-52IPEG4.5-Komplex bei $I_m(\text{NaCl}) = 0.10 \text{ mol/kg}$ von $\log \beta = 6.60 \pm 0.7$ stimmt im Rahmen des Fehlerbereichs sehr gut mit dem Literaturwert überein. Mit zunehmender Ionenstärke war eine signifikante Abnahme der Komplexbildung zu beobachten. Dabei wurden bei den variierenden Ionenstärken die Stabilitätskonstanten $\log \beta (I_m = 1.01) = 6.1 \pm 0.6$; $\log \beta (I_m = 2.04) = 5.6 \pm 0.6$ und $\log \beta (I_m = 2.50) = 5.6 \pm 0.6$ ermittelt. Im untersuchten Ionenstärkebereich nahm somit die Komplexstabilität des Eu(III)-52IPEG4.5-Komplexes um eine Größenordnung ab. Durch Extrapolation mittels der Specific Ion Interaction Theory (SIT) konnten $\Delta\epsilon = -0.33 \pm 0.03$, $\Delta z^2 = 2.31 \pm 0.2$ und $\log \beta^0 = 6.9 \pm 0.7$ bestimmt werden. Diese Daten können in Datenbasen eingepflegt werden und dienen einer zukünftigen Extrapolation der Stabilitätskonstanten der untersuchten Reaktionen auf beliebige Ionenstärken eines zu betrachtenden möglichen Endlagerstandorts.

Der Cm(III)-52IPEG4.5-Komplex ist bisher noch nicht literaturbekannt und wurde im Rahmen dieser Arbeiten erstmal bei $\text{pH}_m = 5.1$ und einer Ionenstärke von $I_m(\text{NaCl}) = 0.10 \text{ mol/kg}$ untersucht. Durch Anwendung des Ladungsneutralitätsmodells wurde für den Cm(III)-52IPEG4.5-Komplex die Stabilitätskonstante $\log \beta = 6.60 \pm 0.7$ ermittelt. Diese ist identisch mit der Stabilitätskonstante des Eu(III)-52IPEG4.5-Komplexes bei derselben Ionenstärke. Dies zeigt, dass Eu(III) durchaus als Modellelement für die dreiwertigen Actiniden verwendet werden kann.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Untersuchung der Komplexbildung von Cm(III) mit 52IPEG4.5 bei $\text{pH}_m = 5.1$ und variierenden Ionenstärken
- Untersuchung der Komplexbildung von Cm(III) und Eu(III) mit 52IPEG4.5 als Funktion des pH_m -Wertes bei variierenden Ionenstärken

5. Berichte, Veröffentlichungen

- S. Özyagan, K. J. Warth T. Sittel, P. J. Panak: Complexation of Cm(III) with monosilicic acid in chloride media, *Appl. Geochem.*, **2025**, 190, 106465
- S. Özyagan, R. E. Gillmeister, T. Sittel, A. Skerencak-Frech, P. J. Panak: Complexation of Eu^{3+} with a polycarboxylate based concrete superplasticizer in chloride media, *Results Chem.*, **2025**, 16, 102399
- S. Özyagan, T. Sittel, A. Skerencak-Frech, P. J. Panak: Interaction of trivalent An(III) with Glenium®51: The Effect of Ionic Strength (in Vorbereitung)
- Bachelorarbeit (Darius Neuhaus): Komplexbildung von Eu(III) und Cm(III) mit dem synthetisch hergestellten Polycarboxylatether-Superplasticizer 52IPEG4.5 als Funktion der Ionenstärke
- Doktorarbeit (Sema Özyagan): Spektroskopische Speziation von dreiwertigen Actiniden und Lanthaniden mit Zementdegradationsprodukten (in Vorbereitung)

Antragssteller(in) / ausführende Stelle: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 11870A
Vorhaben (Thema/Titel): Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren II (UMB-II)		
Themenbereich des Fördervorhabens: 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 31.01.2026		Berichtszeitraum: 01.01.2025 bis 30.06.2025
Gesamtkosten des Vorhabens: 1.226.887,00 EUR		Projektleitung: 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 Smekтите 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 54 Versuche bei 140 °C mit 0,1 M NaCl Lösung, Carrara Marmor der Korngrößenfraktionen von < 0,023 mm, < 0.150 mm, 0.2 – 0.6 mm, 0.6 – 1.2 mm, 1.8 – 2.5 mm (CaCO_3), Aragonit S172 und Gofun Shirayuki (CaCO_3), Rügener Kreide und Champagne Kreide (CaCO_3), Ankerit S252 ($\text{Ca}_{0.5}\text{Fe}_{0.5}\text{CO}_3$), Siderit S259 (FeCO_3), Kutnahorit S382 ($\text{Ca}_{0.75}\text{Mn}_{0.25}\text{CO}_3$), Rhodochrosit S186 (MnCO_3), Dolomit S336 ($\text{Ca}_{0.5}\text{Mg}_{0.5}\text{CO}_3$), Huntit ($\text{Ca}_{0.25}\text{Mg}_{0.75}\text{CO}_3$), Magnesit S183 (MgCO_3), Strontianit S225 (SrCO_3) 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 bzw. Carrara Marmor hinsichtlich der Zersetzungstabilität und der CO_2 -Erzeugung herangezogen. Zu diesem Zweck wurden die weiteren oben genannten Karbonatminerale untersucht. Messgrößen dieser Versuche sind der CO_2 -Gehalt in der Gasphase der Reaktoren, der Karbonatgehalt der eingesetzten Mineralmischungen vor und nach der Reaktion sowie Gehalte am Ca, Mg, K, Gesamtkohlenstoff und dem anorganischen Kohlenstoff in der Überstandlösung. Die Auswertung dieser Messgrößen soll helfen, die zur Karbonatzersetzung in Tonen beitragenden Minerale zu identifizieren.

Die Koordination des Verbundprojektes bestand in der Unterstützung der Organisation des neunten Projekt-Workshops, welches am 23.-24. Juni 2025 durch das Institut für Ressourcenökologie des Helmholtz-Zentrums Dresden - Rossendorf (HZDR) ausgerichtet wurde.

4. Geplante Weiterarbeiten

Abschluss der laufenden Versuchsreihen, Vorbereitungen und Beginn der weiteren Versuchsreihen im AP1.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine

Antragssteller(in) / ausführende Stelle: Helmholtz-Zentrum Dresden – Rossendorf e. V. Institut für Ressourcenökologie		Förderkennzeichen: 02 E 11870B
Vorhaben (Thema/Titel): Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren - Phase II (UMB II), Teilprojekt B		
Themenbereich des Fördervorhabens: 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: 01.01.2025 bis 30.06.2025
Gesamtkosten des Vorhabens: 683.825,00 EUR		Projektleitung: 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 Smekтите vom Bentonit-Typ, (ii) der Einfluss der Fe(II)/Fe(III)-Redoxreaktion (experimenteller und quantenchemischer Ansatz), (iii) die Unterschiede in Korrosionsraten und –produkten an einer Eisen-Bentonit-Grenzfläche (mit Einsatz einer zu optimierenden Mössbauerspektroskopie) und (iv) der Einfluss der Bentonit-eigenen mikrobiellen Population.

Die unter (iv) genannten mikrobiellen Arbeiten werden am HZDR durchgeführt. Hierzu werden Mikrokosmen angesetzt, welche mit einem Bentonit (B27 oder GMZ), synthetischer Opalinuston-Porenlösung (OPA) und Gusseisenplättchen (Typ GGG40) versehen werden. Die Ansätze inkubieren für etwa 3 Jahre jeweils bei 37 und 70°C mit und ohne Zugabe von Wasserstoff.

Bezug 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

Im 9. und letzten Berichtszeitraum wurden die letzten B27- und GMZ-Mikrokosmen nach insgesamt 1281 Tagen Inkubation bei 37 und 70°C beprobt. Alle geochemischen Analysen der Suspension und der filtrierten Porenlösung konnten erfolgreich abgeschlossen werden. Zudem konnte die DNA aus insgesamt 10 Ansätzen erfolgreich isoliert und sequenziert werden. Abschließend wurde auch die elektronenmikroskopische Analyse der inkubierten Gusseisenplättchen erfolgreich durchgeführt.

Auffällig zeigen sich Ansätze, welche mit 2x autoklavierten Bentonit B27 bei 37°C inkubiert wurden. Verglichen zu entsprechenden nicht autoklavierten B27-Ansätzen zeigt sich über die gesamte Inkubationszeit eine beschleunigte Freisetzung von H_2 , CO_2 , Fe(II) und Eisen. Die hier identifizierten Sulfat-reduzierenden Bakterien (SRB) zeigen nur eine geringe metabolische Aktivität. In den entsprechenden nicht autoklavierten B27-Ansätzen wurden hingegen metabolisch sehr aktive SRB identifiziert, welche H_2 und CO_2 für ihren Stoffwechsel nutzen. Die hierbei gebildeten Sulfide reagieren mit den Fe(II) Ionen zu Eisen(II)sulfiden, welche als schwarzer Niederschlag in den Flaschen erkennbar sind. Auf den entsprechenden Gusseisenplättchen konnte *via* SEM-EDX eine Schicht bestehend aus Eisen-Schwefel-Verbindungen identifiziert werden, welche möglicherweise eine weitere Freisetzung von Eisen in Lösung limitiert. Die vergleichsweise geringe SRB-Aktivität in den 2x autoklavierten B27-Ansätzen könnte daher die Ursache für die beschleunigte Freisetzung von H_2 , CO_2 , Fe(II) und Eisen sein.

B27-Ansätze, welche bei 70°C inkubiert wurden, zeigen keine SRB-Aktivität aber eine vergleichsweise stark beschleunigte Freisetzung von CO_2 , H_2 , Fe(II) und Eisen. Die Gusseisen-Oberflächen zeigen erste Anzeichen für den Prozess der *interfacial dissolution-precipitation* (IDR), die bei entsprechenden Gusseisenplättchen, welche bei 37°C inkubiert wurden, nicht nachweisbar ist.

GMZ-Ansätze, welche bei 37°C inkubiert wurden, zeigen eine erhöhte Freisetzung von CO_2 , H_2 und Fe(II) verglichen zu den entsprechenden B27-Ansätzen. Entsprechende Gusseisenoberflächen zeigen hier bereits eine fortschreitende IDR. Noch deutlicher treten diese Prozesse in GMZ-Ansätzen auf, welche bei 70°C inkubiert wurden. Obwohl in GMZ-Ansätzen, welche bei 37°C inkubiert wurden, vereinzelt SRB und deren Aktivität nachweisbar waren, kann ein signifikanter Einfluss auf die Entwicklung geochemischer Parameter oder ein Einfluss auf die Gusseisenkorrosion nicht festgestellt werden. Die Beobachtungen in den GMZ-Ansätzen werden sehr wahrscheinlich durch abiotische Prozesse kontrolliert.

4. Geplante Weiterarbeiten

Die Beprobungen und Analysen wurden erfolgreich abgeschlossen, so dass keine experimentellen Weiterarbeiten geplant sind.

Redaktionell wird abschließend der Abschlussbericht angefertigt. Die Daten sollen zudem in einem Open Access Journal publiziert werden.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Vorträge:

Matschiavelli, N., The microbial community in bentonites B27 and GMZ and its influence on cast iron corrosion– results of the UMB II project –; seminar talk at the HZDR, 13.03.2025

Matschiavelli, N., Cast iron corrosion in a bentonite-based environment with/without microbial influence, 9th project meeting UMB-II; Dresden, 23.-24.06.2025.

Antragssteller(in) / ausführende Stelle: Universität Greifswald, Domstr. 11, 17489 Greifswald		Förderkennzeichen: 02 E 11870C
Vorhaben (Thema/Titel): Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt C		
Themenbereich des Fördervorhabens: C2.3 Geotechnische und technische Barrieren		
Laufzeit des Vorhabens: 01.01.2021 bis 30.06.2025		Berichtszeitraum: 01.01.2025 bis 30.06.2025
Gesamtkosten des Vorhabens: 244.830,00 EUR		Projektleitung: 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 & 2025).

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 Studien wurden verwendet, um die Reaktionskinetik und -geschwindigkeit der Smektitalterierung mit und ohne organische(n) Katalysatoren zu bestimmen. Aus diesen Daten wurde eine Arrhenius-Gleichung abgeleitet, um die Stabilität von Montmorillonit in oxalatreichen natürlichen Systemen, wie z. B. organikreichen Tonsteinen, zu bestimmen – was das Hauptziel der Projektverlängerung war. Diese Gleichung bietet auch eine Grundlage für einen Vergleich mit zuvor veröffentlichten Arrhenius-Beziehungen und ermöglicht einen quantitativen Vergleich des Einflusses von Oxalaten zu Chloriden.

In unseren kinetischen Experimenten, mit reinem Smektit in einer 0,1 M NaCl-Lösung, wurde ebenfalls eine bisher ungekannte Hämatitbildung beobachtet. Deswegen wurden zusätzliche Analysen durchgeführt. Eisenoxide können den Elektronentransfer und das Redoxmilieu auf Tonmineraloberflächen und somit auch Alterationsprozesse in technischen Barriersystemen beeinflussen, einschließlich solcher, die an mikrobielle Aktivitäten beteiligt sind. Darüber hinaus zeigen unsere Experimente, dass Montmorillonit selbst in einfachen NaCl-Lösungen bei erhöhten Temperaturen (160 °C bis 220 °C) bis zu ~7 Gew.-% aufgelöst werden kann. Diese Ergebnisse werden in einem Forschungsartikel vorgestellt und wird derzeit in Applied Clay Science (Sudheer Kumar et al., 2025) begutachtet.

Zusammenfassend haben wir mit unseren Experimenten das Ziel erreicht und zwei unterschiedliche Smektit-Umwandlungsmechanismen (AP-Nr. 3.7) in Systemen mit und ohne organische Säuren zu bestimmen können (Sudheer Kumar et al., 2025, in Begutachtung; Sudheer Kumar et al., 2024).

4. Geplante Weiterarbeiten

Zur Zeit arbeiten wir an unserem Endbericht (AP-Nr. 3.8) bis Dezember 2025.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Sudheer Kumar, R., Warr, L.N., Thombare, B.R., Manzel, T., and Grathoff, G., 2025. Hematite neocrystallisation derived from the experimental alteration of montmorillonite in NaCl solution. Applied Clay Science. (Under review)

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.

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

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), 25.09.2024 - 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.

Antragssteller(in) / ausführende Stelle: Technische Universität München		Förderkennzeichen: 02 E 11870D
Vorhaben (Thema/Titel): Verbund Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren (UMB) Teilprojekt D: Fe(II)/Fe(III)-Redoxreaktion auf atomarem Niveau in Smektiten		
Themenbereich des Fördervorhabens: 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 31.08.2025		Berichtszeitraum: 01.01.2025 bis 30.06.2025
Gesamtkosten des Vorhabens: 339.641,00 EUR		Projektleitung: 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.

Ein Montmorillonitmodell der Schichtladung -0.25 e wurde um Zwischenschichtwasser erweitert, um den Einfluss auf das Redoxpotential von Eisen abzuschätzen (AP 1). Damit lässt sich auch die Qualität umfangreicher Projektergebnisse zur Eisenreduktion in Smektiten, die mit wasserfreien Modellen gewonnen wurden, abschätzen. Verwendet wurden zwei Wassermoleküle pro $2 \times 1 \times 1$ -Einheitszelle, was etwa der geringsten Wasserdichte einer ersten Wasserschicht in der Zwischenschicht entspricht. Optimierungen zeigen, dass Na^+ Hydratation in der Zwischenschicht gegenüber einer direkten Bindung an die Smektitischicht bevorzugt. Dies kann als erster Schritt zu Bildung eines außersphärischen Na^+ -Aquakomplexes in der Zwischenschicht bei höherem Wassergehalt gesehen werden. Für diese Montmorillonitmodelle wurde die relative Anordnung von oktaedrischem Fe(III) und Fe(II) systematisch für trans- und cisvakante Gitter charakterisiert. Relative Energien der Fe-Substitutionen verändern sich durch das Wasser wenig, mit Abweichungen von Trends für Modelle ohne Wasser von $\leq 10\text{ kJ/mol}$. Relative Energien tendieren für Fe(III) zu etwas größeren Werten, für Fe(II) zu kleineren. Relative Reduktionspotentiale werden im Allgemeinen etwas negativer. Ausnahmen finden sich für benachbarte Fe und Mg. Effekte des Zwischenschichtwasser sind gewöhnlich $< 100\text{ mV}$ und bestätigen damit die Ergebnisse wasserfreier Smektitmodelle. Deren Ergebnisse sind damit als qualitativ korrekt und als 10-20 % zu hoch einzuschätzen. Bis auf die Überprüfung von Abweichungen von Trends sind diese Untersuchungen abgeschlossen.

Zur Modellierung der Eisenreduktion an Kantenflächen wurde ein Schichtmodell der (010)-Oberfläche eines transvakanten Smektit mit Wasserbedeckung verbessert (AP 1). Um verschiedene Oberflächenphänomene besser charakterisieren zu können, wurde eine ideal terminierte, defektfreie Oberfläche äquilibriert. Derzeit werden Rechnungen unternommen, um davon abweichende Strukturen an der Oberfläche zu identifizieren. Vorläufige Ergebnisse zeigen, dass fünffach koordiniertes $\text{Al}(\text{OH})$ sowie deprotonierte SiOH -Gruppen mit kompensierenden $\text{Al}(\text{H}_2\text{O})_2$ -Gruppen nicht ausgeschlossen werden können.

Anhand der ideal terminierten (010)-Oberfläche transvakanten Pyrophyllits wurde der Effekt der Oberfläche auf oktaedrische Substitutionen Fe(III), Fe(II) und Mg(II) modelliert (AP 3). Dabei wurde die Solvation nur bei Störung durch eine geladene Substitution an der Oberfläche äquilibriert. Bisherige Ergebnisse zur Stabilisierung der Substitutionen konnten verbessert werden und es wurde die Reihenfolge $\text{Fe(III)} < \text{Mg(II)} < \text{Fe(II)}$ erhalten, wobei im Mittel für Fe(II) eine Stabilisierung von 35 kJ/mol erreicht wurde und ein positiver Effekt auf das Redoxpotential von 200 mV . Ergebnisse zur Speziation an der Oberfläche zeigen verschiedene Strukturen der Substitution. Zu den stabileren gehören für Fe(II) $\text{Fe}(\text{OH}) + \text{Na}^+$ mit fünffacher Koordination und $\text{Fe}(\text{H}_2\text{O})_2 + \text{SiO}$ mit kompensierendem Na^+ . Verbesserungen des Modells durch Äquilibration von Fe(III) an der Oberfläche sowie der Vergleich der bisher stabilsten Formen von Fe(II) an der Oberfläche deuten darauf hin, dass der Oberflächeneffekt auf die Reduktion mit $\pm 50\text{ mV}$ kleiner ausfällt als im einfachen Modell und damit deutlich kleiner ist als der benachbarter geladener Substitutionen. Dieser vorläufige Befund wird durch weitere Äquilibration und Vergleich verschiedener Oberflächenspezies weiter untersucht.

Montmorillonitmodelle mit einer größeren $2 \times 2 \times 1$ -Einheitszelle (AP 1) wurden konstruiert, um die Ladungsabhängigkeit der Eisenreduktion (AP 2) untersuchen zu können. Vier transvakante Modelle mit Schichtladungen von $-1/8$ bis $-4/8\text{ e}$ zeigen für eine gegebene Anordnung von Fe und Mg nur geringe Effekte der Ladung und insbesondere kein systematisch sinkendes Redoxpotential mit sinkender Schichtladung. In allen Modellen ist der Einfluss der Anordnung oktaedrischer Substitutionen dominierend. Die mit sinkender Schichtladung zunehmende Zahl von Mg-Substitutionen führt allerdings zur Verringerung der Zahl vorteilhafter Plätze für Eisen. Unter der Annahme einer zufälligen Verteilung der Eisensubstitutionen führt dies zu einer Abnahme des Reduktionspotentials im Mittel mit sinkender Schichtladung.

4. Geplante Weiterarbeiten

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

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Antragssteller(in) / ausführende Stelle: Leibniz Universität Hannover, Welfengarten 1, 30167 Hannover		Förderkennzeichen: 02 E 11870E
Vorhaben (Thema/Titel): Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren II – Phase II (UMB II), Teilprojekt E		
Themenbereich des Fördervorhabens: C2.3: Sicherheits- und Endlagerkonzepte		
Laufzeit des Vorhabens: 01.01.2021 bis 31.12.2025		Berichtszeitraum: 01.01.2025 bis 30.06.2025
Gesamtkosten des Vorhabens: 228.860,00 EUR		Projektleitung: 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 Smekтите vom Bentonit-Typ, (ii) der Einfluss der Fe(II)/Fe(III)-Redoxreaktion (experimenteller und quantenchemischer Ansatz), (iii) die Unterschiede in Korrosionsraten und –produkten an einer Eisen-Bentonit-Grenzfläche (mit Einsatz einer zu optimierenden Mößbauerspektroskopie) und (iv) der Einfluss der Bentonit-eigenen mikrobiellen Population.

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

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

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

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

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP1 & AP2: Es wurden Versuche unternommen, einzelne Phasen innerhalb der Bentonite durch eine vorherige Trennung über Dichtefraktionierung den diskreten Signalen der Mößbauerspektren zuzuordnen. Die Analyse wurde durch die Röntgendiffraktometrie unterstützt und lieferte bisher vielversprechende Ergebnisse.
- AP3: Im Rahmen des Forschungsprojekts wurde auf Basis der Stabilitätskriterien nach Lyapunov eine erweiterte Methodik zur theoretischen und praktischen Stabilitätsanalyse sowohl linearer als auch nichtlinearer dynamischer Systeme entwickelt. Für lineare Systeme konnte ein erster mathematischer Stabilitätsnachweis erbracht werden. Die entwickelte Methode beruht auf der systematischen Anregung mit sinusförmigen Eingangssignalen sowie der anschließenden Analyse der resultierenden Ausgangstrajektorien. Dabei liegt der Fokus insbesondere auf der kurventheoretischen Auswertung von Trajektorien zweier Systemgrößen, die durch eine Differentialbeziehung miteinander verknüpft sind. Diese Methodik ist universell anwendbar und eignet sich sowohl für elektrische als auch für mechanische und weitere Systeme. Auf dieser Grundlage konnten sämtliche elektrische und mechanische Teilprozesse des MIMOS-Systems detailliert hinsichtlich ihres Stabilitätsverhaltens untersucht werden. Darüber hinaus wurden verschiedene Regelungskonzepte zur Ansteuerung von Antriebssystemen simulativ implementiert. Erste Regelungsverfahren wurden zudem praktisch am realen System erprobt.

4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1 & AP2: Es sollen weitere Mößbauermessungen für die weiteren Arbeitsgruppen des Verbundprojekts aufgenommen und ausgewertet werden. Zur Unterstützung der Phasenanalyse sollen reine Mineralien beschafft werden. Die letzten Proben der Langzeit-Korrosionsversuche sollen analysiert werden, sobald sie von der BGR erhalten werden.
- AP3: Im weiteren Verlauf ist die Herleitung zusätzlicher Stabilitätsnachweise für nichtlineare Systeme empfehlenswert. Zudem sollten verschiedene Regelungsverfahren praktisch am Antriebssystem implementiert und verglichen werden, um die effektivste Regelungsstrategie für den praktischen Einsatz zu identifizieren.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Antragssteller(in) / ausführende Stelle: Leibniz Universität Hannover Institut für Erdsystemwissenschaften, Abteilung Bodenkunde		Förderkennzeichen: 02 E 11870F
Vorhaben (Thema/Titel): Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt F		
Themenbereich des Fördervorhabens: 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: 01.01.2025 bis 30.06.2025
Gesamtkosten des Vorhabens: 347.200,00 EUR		Projektleitung: 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 tomographische *in situ* Untersuchung der mit Oxidation/Versauerungsreaktion verbundenen Gasentstehung durch Freisetzung von CO₂ in verdichteten Bentoniten wurde an der tomographischen Strahllinie der Synchrotroneinrichtung DESY vorgenommen. Für die Messungen der Veränderungen im Bentonit durch initiale Gasfreisetzung wurden Proben auf die für Bentonit-basiertes Versatzmaterial in geotechnischen Barrieren hohe typische Trockendichte von 1,5 und zum Vergleich 1,2 g/cm³ eingestellt. Bei erhöhter Trockendichte wurde eine Einregelung der Schichtsilicate senkrecht zur Druckrichtung erhalten. Die Auswertung der Aufnahmen erfolgte mittels Bildanalyse in Form von Schnittdarstellungen (ca. 4 mm in Längsrichtung) durch die in einem Röhrchen befindliche Probe. Die Versuche zeigten, dass höhere Dichte zu einer langsameren Entstehung von Gas-gefüllten Porenräumen führt, die sich entlang der bevorzugten Orientierung der Schichtsilicate anordnen. Eine Zunahme an Zirkularität der Gasbläschen ist bei gering eingestellter Dichte eher zu beobachten als bei hoher. Dies zeigt eine größere Stabilität der Tonmatrix bei hoher Verdichtung an. Für die *in situ* Versuche zur Entgasung wurde neben Lösungen mit 1% H₂O₂ als Oxidationsmittel auch deionisiertes Wasser eingesetzt. Auch durch die Zugabe von deionisiertem Wasser

werden im Elektronenstrahl bereits nach 10 Minuten Entgasungsreaktionen ersichtlich, die auf einen relativ leichten Eintritt von Oxidationsreaktionen hinweisen. Für Bentonit B19, der im Laborversuch durch umfängliche Gasentstehung nicht auffällig wurde, konnte hier in geringem Umfang ebenfalls begrenzte Gasentstehung nachgewiesen werden.

Die Umsetzungen von Schwermineralen bei der Versauerungsreaktion, abgeleitet aus tomographischen Aufnahmen aus der von der GRS erhaltenen Reaktionszeitreihe bei 120°C und 2 bar, steht ganz in Abhängigkeit von der mineralogischen Zusammensetzung dieser Fraktion. Während für Bentonit B37, wo diese Fraktion aus hohen Anteilen an Phlogopit besteht, keine Hinweise auf eine umfängliche Beteiligung an schnellen Versauerungsreaktionen erhalten wurde, zeigen sich für Bentonit SD-80 Abnahmen nach 500 h Reaktionszeit von ca. 50 vol.%, die vermutlich auf die Labilität der Hauptbestandteile in dieser Fraktion Pyrit, Siderit und Markasit, zurückzuführen sind.

AP2: Um den Beitrag von Schwermineralen an schnellen Versauerungsreaktionen in Bentoniten besser bewerten zu können, wurde Dichtentrennung mit Natrium-Polywolframatlösung bei 2,9 g/cm³ an 5 Bentoniten und einem Vergleichston in größerem Umfang durchgeführt, um (i) der Arbeitsgruppe von Prof. Renz LUH-ACI für Mössbauerspektroskopische Untersuchungen Proben der leichten und schweren Mineralfraktion zur Verfügung zu stellen um die Interpretation der für die Bentonite erhaltenen Spektren zu verbessern und auch die in der schweren Fraktion auftretenden Mineralarten, die zum Teil einen hohen Fe(II)-Gehalt aufweisen, besser zu kennzeichnen. (ii) Weiterhin wurde die schwere Fraktion zur Mineralartenbestimmung in die Röntgenbeugungsanalyse eingesetzt. Hier zeigte sich, dass die mineralogische Zusammensetzung der schweren Fraktion zwischen den verschiedenen Bentonitherkünften erheblich abweicht, sowohl in der Art als auch der Anzahl der auftretenden Mineralphasen. Die mineralogische Analyse trägt hier erheblich zur Identifikation von Bentoniten mit schneller Versauerungsreaktion bei, vermag aber nicht die Kinetik des Oxidationsverlaufes eingehend zu kennzeichnen. Diese Aussage ist nasschemischen Laborversuchen vorbehalten.

AP4: Vom HZDR wurden weitere Bentonitproben und GGG40-Plättchen aus Mikrokosmenversuchen der Zeitreihe nach 1281 Tagen erhalten. Korrosionsbedingte Abläufe der Plättchen wurden durch Analyse des DC-löslichen Fe, Al, Mn und Si an dem umgebenden Ton mit nachfolgender Quantifizierung der gelösten Elementmengen am ICP-OES gekennzeichnet. Der Gehalt an Fe-Oxiden in den Bentoniten wird zum einen durch die Korrosion der Plättchen zum anderen durch Fe-Freisetzung aus Smectiten und Schwermineralen bedingt. Aus der letzten Versuchsreihe wurden 13 GGG40 Plättchen erhalten und in Rauigkeitsuntersuchungen zur Kennzeichnung der Mikromorphologie der Korrosion einbezogen. Zusätzlich wurden die in die Versuche eingesetzten Bentonite, auch solche ohne Kontakt zu GGG40 Plättchen (25 Proben), bezüglich der Veränderung der Oberflächenladung und Matrixstabilität durch die Fe-Freisetzung aus Plättchen, Ton- und Schwermineralen untersucht. Nach einer Versuchsdauer von 1281 Tagen war durch die neu gebildeten Fe Oxide eine Stabilisierung der Tonstruktur durch Zementierung der Poren feststellbar. In Zetapotentialmessungen ergab sich zum Teil auch Ladungsumkehr der Proben von negativer nach positiver Oberflächenladung, die auf den hohen Ladungsnullpunkt von Fe-Oxiden zurückzuführen ist.

4. Geplante Weiterarbeiten

Erstellung von der geplanten Veröffentlichung und dem Abschlussbericht.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Es wurde an einem zusammenfassenden Manuskript mit dem Arbeitstitel „Acidifying clays: Kinetics of Fe(II) oxidation and mineral contributions“ gearbeitet.

Antragssteller(in) / ausführende Stelle: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 11880
Vorhaben (Thema/Titel): Sicherheitsrelevante Untersuchungen zur Bentonitaufsättigung (SIRUB)		
Themenbereich des Fördervorhabens: C2.3: Geotechnische und technische Barrieren		
Laufzeit des Vorhabens: 01.04.2021 bis 30.09.2025	Berichtszeitraum: 01.01.2025 bis 30.06.2025	
Gesamtkosten des Vorhabens: 1.468.292,50 EUR	Projektleitung: Michael 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 (BMWA), GRS-199)

b) Wie quillt Bentonit in einen begrenzt freien Raum?

Motiviert durch Mitarbeit in der Task Force EBS, Projekt WiGru-9 (FKZ 02E11941 (BMW), laufend) und einen Demonstrationsversuch mit Pellets im EU-Projekt BEACON

c) Können Einheitsisothermen aus Montmorillonitgehalt und Kationentyp abgeleitet werden?

Motiviert durch beobachtete Unterschiede in Na- und Ca-Bentonit, Projekt BIGBEN (FKZ 02E11284 (BMW), GRS-615)

d) Welche Endporositäten werden nach voller Aufsättigung mit Wasserdampf erreicht?

Motiviert durch neuerliche Auswertung der Versuche im Projekt EBS (s.o.) im Projekt WiGru-7 (FKZ 02E11102 (BMW), GRS-503)

e) Mit welcher Dynamik wird Wasser aus Klüften im Kristallin in den Buffer eingetragen?

Ergänzung der Task 8 „Buffer-Rock Interaction“ der Task Forces EBS und GWFTS mit Blick auf die Fließvorgänge in einer Kluft, BMW-Projekte E-DuR, WiGru-6, A-DuR, WiGru-7, QUADER (FKZ 02E10336, 02E10548, 02E10558, 02E11102 und 02E11213, GRS-430)

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

Bei der Durchführung des Vorhabens werden folgende Arbeitspakete bearbeitet:

AP 1: Vorbereitende Arbeiten

AP 2: Aufsättigung am Bentonit-Wasser-Kontakt

AP 3: Begrenzt freie Quellung

AP 4: Einheitsisothermen

AP 5: Endporosität nach der Aufsättigung über Dampf

AP 6: Interaktion von Grundwasser und Bentonit im Kristallin

AP 7: Erstellung des Abschlussberichts

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Zu AP1: Eine Prozedur für die Kalibration des Infrarot Messsystems wurde erarbeitet.

Zu AP2/AP3: Die neue Beobachtungszelle wurde erfolgreich im Rahmen von Vorversuchen getestet.

Zu AP 4: Die Arbeiten sind abgeschlossen.

Zu AP5: Die Aufsättigungsmessungen über Wasserdampf und mit flüssigem Wasser zur Bestimmung der Endporosität wurden fortgesetzt. Der Zustand einer vollen Aufsättigung ist beinahe erreicht, aber es ist immernoch ein langsamer Zuwachs zu verzeichnen.

Zu AP6: Eine Interaktion zwischen Bentonit und der aufsättigenden Kluft konnte erfolgreich beobachtet werden. Die Intensität dieser Interaktion hängt maßgeblich von der Kluftweitenverteilung ab. Um die Varianz der Wechselwirkung zu untersuchen, wurden Versuche mit unterschiedlichen Kluftweitenverteilungen durchgeführt. Die Wechselwirkungen fallen umso stärker aus, je kleiner die Kluftweiten sind.

Zusätzliche Arbeiten:

- Mit der Messung von Adsorptions- und Desorptionsisothermen der genommenen Bentonitproben aus dem Prototype Repository wurde begonnen.
- Die Implementierung einer neuen 1D Randbedingung für geringe Wasserzuströme in das COMSOL-Viper Interface wurde fortgesetzt. Dabei wurde ein Fehler in der Ableitung der Weak-Form für die Erhaltungsgleichung entdeckt.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Fortsetzung der Aufsättigungsversuche (AP2 und AP3)
- Beenden der Aufsättigungsversuche über Dampf und Wasser (AP5)
- Abschluss des geplanten Messprogramms (AP6)
- Fortsetzung der Messung von Adsorptions- und Desorptionsisothermen an den genommenen Bentonitproben und Auswertung
- Korrektur des gefundenen Fehlers im COMSOL-Viper und Fertigstellung der neuen Implementierung

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine

Antragssteller(in) / ausführende Stelle: BGE TECHNOLOGY GmbH		Förderkennzeichen: 02 E 11890A
Vorhaben (Thema/Titel): Entwicklung und Test eines erweiterten Hoek-Brown Stoffmodells zur Berücksichtigung anisotropem Festigkeitsverhaltens bei der Anwendung der Integritätskriterien für kristalline Wirtsgesteine		
Themenbereich des Fördervorhabens: 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: 01.01.2025 bis 31.01.2025
Gesamtkosten des Vorhabens: 492.526,40 EUR		Projektleitung: R. Paola León Vargas

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Das vorliegende Projekt zielt auf die Entwicklung und den Test eines erweiterten dreidimensionalen Hoek-Brown-Stoffmodells ab, das in der Lage ist, anisotropes Festigkeitsverhalten speziell in einem mit mehreren Klüften durchzogenen Gebirgskörper zu berücksichtigen. Es geht darum, die Grenzbedingung so zu formulieren, dass die festigkeitsreduzierenden Eigenschaften des jeweiligen Kluftsystems im Zuge des Integritätsnachweises adäquat berücksichtigt werden können. Das 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. Zur Berechnung des effektiven Spannungszustandes wird auch der Biot-Koeffizient als hydromechanischer Kopplungsparameter im geklüfteten Gestein herangezogen. Die Durchführung des Projektes erfolgt in enger Zusammenarbeit mit der Technischen Universität Bergakademie Freiberg.

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

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

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

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im Rahmen von AP4 wurde letzte Validierungen der hydromechanischen Kopplung durchgeführt. Während zuvor der Fokus der Verifizierungs- und Validierungsarbeiten auf mechanischen Aspekten lag, wurde nun die hydromechanische Kopplung integriert, um den Einfluss des Porendrucks auf die effektiven Spannungen im Gebirge zu berücksichtigen. Zur Überprüfung der Gleichungsimplementierung in FLAC3D wurden kleinmaßstäbliche Modelle eingesetzt.

Im AP5 wurde der Abschlussbericht finalisiert. Der Bericht fasste die Projektergebnisse strukturiert zusammen. Diese enthält einen technischen Anhang mit Laborergebnissen, Verifizierungs- und Validierungsdaten, Modellparametern sowie Benchmark-Vergleichen zwischen FLAC3D, OGS und 3DEC.

4. Geplante Weiterarbeiten

Keine, das Projekt endete im Berichtszeitraum

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine

Antragssteller(in) / ausführende Stelle: Technische Universität Bergakademie Freiberg		Förderkennzeichen: 02 E 11890B
Vorhaben (Thema/Titel): Verbundprojekt: Entwicklung und Test eines erweiterten Hoek-Brown Stoffmodells zur Berücksichtigung anisotropen Festigkeitsverhaltens bei der Anwendung der Integritätskriterien für kristalline Wirtsgesteine (BARIK), Teilprojekt B		
Themenbereich des Fördervorhabens: 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: 01.01.2025 bis 31.01.2025
Gesamtkosten des Vorhabens: 382.918,55 EUR		Projektleitung: 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

Finale Dokumentation der numerischen Ergebnisse und experimentellen Laborergebnisse. Erstellung eines zusammenfassenden Endberichts und Bereitstellung der Unterlagen für die Projektpartner anhand einer Cloud zur Erstellung des gemeinsamen Abschlussberichts.

4. Geplante Weiterarbeiten

5. Berichte, Veröffentlichungen

Antragssteller(in) / ausführende Stelle: Rheinisch-Westfälische Technische Hochschule Aachen		Förderkennzeichen: 02 E 11931
Vorhaben (Thema/Titel): Einfluss der thermischen Reife auf die gekoppelten hydro-mechanischen Eigenschaften niedrig-durchlässiger Tonsteine – Feld & Laborskala (Maturity)		
Themenbereich des Fördervorhabens: C1.2: Standortauswahl		
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2021 bis 31.05.2026		Berichtszeitraum: 01.01.2025 bis 30.06.2025
Gesamtkosten des Vorhabens: 1.299.689,00 EUR		Projektleitung: 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 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. Vitrinitreflektion, RockEval Pyrolyse, XRF-Daten) wurden durchgeführt, um eine generelle und quantitative Charakterisierung der Tonsteine, auch hinsichtlich ihrer thermischen Reife, durchzuführen.

Die Messungen zur hydraulischen Konduktivität in Abhängigkeit von effektiven Spannungen (5 -> 10 -> 20 -> 10 -> 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.

Die Messreihen zur Bestimmung der einachsigen Druckfestigkeit wurden für alle Bohrungen abgeschlossen. Dabei wurden die Tests an Prüfkörpern durchgeführt, welche bei unterschiedlichen Saugspannungen äquilibriert wurden. Die Ergebnisse zeigen zunehmende Festigkeitswerte mit abnehmender Sättigung, und eine generelle Tendenz zu höheren Festigkeiten mit zunehmender maximaler Versenkungstiefe. Triaxialtests (konsolidiert, undränniert) wurden an Prüfkörpern aller Lokationen bei zwei unterschiedlichen effektiven Einspannungen (4 und 10 MPa) durchgeführt. Es lassen sich so Reibungswinkel und Kohäsion mittels Mohr-Coulomb-Bruchkriterium ableiten, welche eine Korrelation mit thermischer Reife aufweisen. Das allgemeine poromechanische Verhalten unterscheidet sich zwischen den Lokationen nicht.

Eine erste Analyse der Loggingdaten erfolgte hinsichtlich der durchteuften lithostratigraphischen Bohrlochsequenzen. Akustische Televue Logs wurden hinsichtlich der räumlichen Kluftverteilungen und Kluftgeometrien analysiert. Eine erste Versuchsreihe hydraulischer Bohrlochversuche wurde mittels der SPDP-Systeme an den Lokationen BO1, BO3 und BO5 durchgeführt. Die Detailauswertung der Ergebnisse steht noch aus.

4. Geplante Weiterarbeiten

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

Mit der Vervollständigung der petrophysikalischen und geomechanischen Daten im kommenden Halbjahr können weitgehende Korrelationen zwischen physikalischen Gesteinseigenschaften und thermischer Reife bis zum Projektende 2026 herausgearbeitet werden.

5. Berichte, Veröffentlichungen

- Burchartz, R., Seemann, T., Gaus, G., Winhausen, L., Jalali, M., Mbui, B. M., Grohmann, S., Burnaz, L., Colling Cassel, M., Erbacher, J., Littke, R. and Amann, F. (2025). The influence of burial history on physical properties of claystones—Overview of a systematic research program across scales. *EGU sphere*, 2025, 1-46.
- Castro-Vera, L., Gaus, G., Colling Cassel, M., Amberg, S., & Littke, R. (2025). 3D basin modeling of the Lower Saxony Basin, Germany: the role of overpressure in Mesozoic claystones with implications for nuclear waste storage. *International Journal of Earth Sciences*, 114(2), 221-247.

Antragssteller(in) / ausführende Stelle: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 11981A
Vorhaben (Thema/Titel): Implementierung eines Monitoringsystems zur Evaluierung der Korrosionsvorgänge an Behältermaterialien in Bentonit-basierten Endlagerkonzepten (IMKORB), Teilprojekt A		
Zuordnung zum FuE-Förderprogramm: C3.1 Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-)Phänomene und Prozesse		
Laufzeit des Vorhabens: 01.08.2021 bis 30.09.2026	Berichtszeitraum: 01.01.2025 bis 30.06.2025	
Gesamtkosten des Vorhabens: 972.561,50 EUR	Projektleitung: PD Dr. habil. Andrés G. Muñoz	

1. Vorhabenziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Dieses Vorhaben verfolgt eine grundlegende Beschreibung der möglichen Korrosionsvorgänge in der technischen Barriere, 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 die Entwicklung eines Monitoringsystems.

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)

Korrosion unter Gamma-Strahlung

Die spektroskopischen (REM-EDX und XPS), kristallographischen (XRD) und metallographischen Analysen der Proben von den an den UJV-Rez-Laboren durchgeführten Korrosionsexperimenten von Gusseisen GGG40 in gesättigtem Bentonit unter Gamma-Strahlung wurden mit dem Ziel einer Veröffentlichung mit den Partnern KIT, IW-LUH und BGR diskutiert und neu ausgewertet. Die Arbeit legt den Fokus auf die chemische und morphologische Entwicklung der Gusseisen-Bentonit-Grenzfläche während der Korrosion unter Gamma-Strahlung.

Elektrochemie von GGG40

Zur Interpretation der Ergebnisse der Langzeitexperimente in gesättigtem Bentonit sind einige komplementären elektrochemischen Messungen (Polarisation, elektrochemische Impedanz) mithilfe einer klassischen Drei-Elektroden-Glaszelle durchgeführt. Die elektrochemische Aktivität der metallographischen Phasen in GGG40 wird durch Experimente mit Graphit und mit zwei Stählen von unterschiedlichen Ferrit-Pearlit-Verhältnisse (S355MC und S355 JN+C).

Monitoring der Grenzflächenparameter in Langzeit-Laborexperimenten (AP 1.2)

Die Auswertung der Langzeitexperimente von GGG40 in Wyoming-Bentonit, gesättigt mit Opalinus-Wasser benötigte zusätzliche Information bezüglich des Einflusses vom Sauerstoff und vom Bentonit auf das elektrochemische Verhalten. Vergleichbare Langzeitexperimente (mit einer Dauer von 2 Monaten) wurden daher mit diesem Material mithilfe der Bentonit-Zelle bei 30°C in mit Stickstoff gespülten Bentonit-Suspension und Opalinus-Wasser durchgeführt. Der Korrosionsverlauf wurde ebenso mit Niedrigstrom-Polarisationen und elektrochemischer Impedanz verfolgt.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Untersuchung des elektrochemischen Verhaltens von Edelstählen mit unterschiedlichen PREN-Werten, CuNi-Legierungen und GGG40 mit Fokus auf die Mikrostruktur mittels der elektrochemischen Rastermikroskopie: Tropfenzellen- und Scanning-Kelvin-Modus / in Zusammenarbeit mit GNS und IW-LUH / Schnittstelle EURAD II - InCoManD
- Elektrochemische Untersuchungen der Selbstheilungsvermögens von gekratzten PVD-hergestellten Beschichtungen aus Ti, Cr und Ti/Cu- und Cr/Cu-Multilagen / Schnittstelle EURAD II- InCoManD / In Zusammenarbeit mit dem KIPT-Institut aus Kiev.

5. Berichte, Veröffentlichungen

- A.G. Muñoz, D. Schild, Corrosion of Spheroidal Graphite Cast Iron GGG40 in Anoxic Opalinus-Clay Water: Influence of Hydrostatic Pressure. Materials and Corrosion (2005) <https://doi.org/10.1002/maco.202414761>
- A.G. Muñoz, D. Schild, S. Kaufhold, D. Dobrev, V.F. Viebranz, and Th. Hassel, Effects of γ -radiation on the interfacial chemistry of spheroidal graphite cast iron in contact with Wyoming bentonite slurry, Surfaces and Interfaces (to be submitted).

Antragssteller(in) / ausführende Stelle: Karlsruher Institut für Technologie (Großforschungsaufgabe) Institut für Nukleare Entsorgung (INE)		Förderkennzeichen: 02 E 11981B
Vorhaben (Thema/Titel): Verbundprojekt: Implementierung eines Monitoringsystems zur Evaluierung der Korrosionsvorgänge an Behältermaterialien in Bentonit-basierten Endlagerkonzepten (IMKORB), Teilprojekt B.		
Themenbereich des Fördervorhabens: C3.1 Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-)Phänomene und Prozesse zugeordnet.		
Laufzeit des Vorhabens: 01.08.2021 bis 31.07.2025		Berichtszeitraum: 01.01.2025 bis 30.06.2025
Gesamtkosten des Vorhabens: 459.413,62 EUR		Projektleitung: 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: (i) Die Auswertung der Analysen aller Proben aus Versuchen unter statischen und dynamischen Bedingungen wurde abgeschlossen und ein mechanistisches Modell entwickelt. Ergebnisse deuten auf die Bildung verschiedener Sekundärphasen an der Stahl/Bentonit Grenzfläche hin. An der Coupon Kontaktfläche bilden sich überwiegend Eisen (Hydr)oxide (z.B. Magnetit). Weiter entfernt bilden sich verstärkt Eisensilikate und Eisenhydroxykarbonat (z.B. Chukanovit). Diese Strukturierung wird deutlicher bei längeren Korrosionszeiten. Die Stahlsorte scheint keine große Rolle für diese Prozesse zu spielen. Zu vergleichbaren Schlussfolgerungen führen Experimente mit einem weiteren Bentonit (Gaomiaozi, welcher in China als potentiell Puffermaterial in Betracht kommen könnte).

(ii) Aus Versuchen in Gefäßen mit gasdichten Schliffstopfen wurden Gusseisenproben mit Kontaktzeiten bis zu 1.5 a geöffnet. Die Korrosionsrate nimmt mit zunehmender Zeit ab, von ca. 12 µm/a nach 4 Wochen bis ca. 3 µm/a nach 9 Monaten und bleibt dann konstant bei 3 µm/a bei 1.5 a Kontaktzeit. Der Start pH-Wert lag bei ca. 8.7 und hat sich in diesem Zeitraum kaum geändert. Mit einer mikro pH-Elektrode wurde festgestellt, dass der pH-Wert im gesamten Experiment sehr ähnlich ist, und direkt am Stahl ca. 0,1 Einheit höher. Hingegen herrscht ein signifikanter E_h Gradient von ca -250 mV direkt am Coupon bis +200 mV weiter entfernt. Die in situ pH Messung ist aufgrund einer hohen Messunsicherheit der Elektrode unter diesen Bedingungen gescheitert. Wegen einer zu geringen Konzentration konnte die Fe Konzentration mittels regulärer ICP-MS in den ultrazentrifugierten Porenwässern nicht quantifiziert 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 abgeschlossen und an der Universität eingereicht.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP 3: (i) In der Serie unter statischen (mit Autoklaven) bzw. unter dynamischen Bedingungen sind keine Weiterarbeiten geplant. (ii) Aus Versuchen in Gefäßen mit gasdichten Schliffstopfen sollen die letzten Experimente mit dem Feinkornbaustahl nach 1,5 Jahren Kontaktzeit geöffnet, analysiert und ausgewertet 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 im Juli 2025 verteidigt werden.

5. Berichte, Veröffentlichungen

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

Antragssteller(in) / ausführende Stelle: Leibniz Universität Hannover		Förderkennzeichen: 02 E 11981C
Vorhaben (Thema/Titel): Verbundvorhaben: Implementierung eines Monitoringsystems zur Evaluierung der Korrosionsvorgänge an Behältermaterialien in Bentonitbasierten Endlager-Konzepten (IMKORB), Teilprojekt C		
Themenbereich des Fördervorhabens: C2.3 Geotechnische und technische Barrieren C2.4 Monitoring		
Laufzeit des Vorhabens: 01.08.2021 bis 31.07.2025		Berichtszeitraum: 01.01.2025 bis 30.06.2025
Gesamtkosten des Vorhabens: 588.972,74 EUR		Projektleitung: 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 im 2. HJ 2024 begonnene Messkampagne zur ortsbezogenen Ermittlung der Kornorientierungen wurde abgeschlossen. Die Materialien CuNi30Mn1Fe (2.0882) und GJS 400-15 (0.7040) wurden im Dialog mit dem Projektpartner GRS ausgewählt und durch diesen entsprechend bereitgestellt. Mithilfe des definierten Rasters aus Mikrohärteeindrücke (HV0,1) mit einem Punktabstand von 250 µm wurden auf den zylindrischen Coupons je Probe vier Bereiche untersucht. Das Referenzgitter ermöglicht die Zuordnung von Lage und Orientierung der Messbereiche für die folgenden elektrochemischen Untersuchungen.

Die mittels XRD-Messungen festgestellte regellose Textur des Werkstoffes CuNi30Mn1Fe (2.0882) wurde durch die EBSD Messungen bestätigt. Die durchschnittliche Korngröße liegt bei 33 µm. Die isotrope Orientierungsverteilung und geringe Korngröße lassen vermuten, dass die Korrosionseigenschaften mehrheitlich durch die thermodynamischen Eigenschaften der Korngrenzen bestimmt werden. Die zylindrischen Gussproben des Werkstoffes GJS 400-15C (0.7040) weisen keine Fasertextur der ferritischen Matrix (bcc) auf, während diese für das GJS 400-15C Blockmaterial nachgewiesen werden konnte. Trotz der isotropen Orientierungsverteilung der ferritischen Matrix wurde eine gerichtete Kristallisation des Sekundärzementits (Punktgruppe Pmna) an den Korngrenzen ermittelt. Es konnte eine Vorzugsorientierung der {100} Ebene parallel zur Probenoberfläche bestimmt werden. Die durchschnittliche Korngröße der ferritischen Matrix liegt bei 46 µm.

Um die Wechselwirkungen zwischen den Kornorientierungen und den elektrochemischen Eigenschaften zu bestimmen wurden die Proben der GRS übergeben. Bei der Bewertung der elektrochemischen Ergebnisse muss besonders bei dem mehrphasigen Werkstoff GJS 400-15C (0.7040) eine Unterscheidung zwischen den lokalen Korrosionseigenschaften und den integralen Korrosionseigenschaften aus dem 2. HJ 2024 erfolgen.

4. Geplante Weiterarbeiten

Im 2. HJ 2025 wird nach Abschluss der Untersuchungen des Projektpartners ein umfängliches Eigenschaftsprofil für jeden Werkstoff verfasst, dass neben den mikrostrukturellen auch die elektrochemischen Eigenschaften berücksichtigt. Um die Ergebnisse des Projektverbundes einerseits in der notwendigen Qualität und Quantität zu gewährleisten, plant das Konsortium eine Laufzeitverlängerung, um einen gemeinsamen Projektabschluss zu ermöglichen. Darüber hinaus wird hierdurch eine Übertragung der methodischen Projektansätze auf zu planende Langzeitexperimente (z.B. Grimsel) ermöglicht. Hierzu plant das Konsortium nach Abschluss des Vorhabens IMKORB die weiterführende Untersuchung praxisrelevanter Monitor- und Behälterkonzepte.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Kaufhold, S., Kahra, C., Hassel, T., Finck, N., & Muñoz, A. (2025). Screening of Six Different Potential HLRW Canister Materials Surrounded by Bentonite. *Journal of Nuclear Materials Management*, 52(2), 4-15.

Antragssteller(in) / ausführende Stelle: Karlsruher Institut für Technologie (Universitätsaufgabe) Kompetenzzentrum für Materialfeuchte		Förderkennzeichen: 02 E 12001A
Vorhaben (Thema/Titel): Verbundvorhaben: Sandwich Support Projekt 1: Heterogene Bentonithydratation (Sandwich-SP1), Teilprojekt A		
Themenbereich des Fördervorhabens: C2.3 Geotechnische und technische Barrieren		
Laufzeit des Vorhabens: 01.12.2021 bis 31.12.2025	Berichtszeitraum: 01.01.2025 bis 30.06.2025	
Gesamtkosten des Vorhabens: 323.058,00 EUR	Projektleitung: 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 Bentonitdichteelementen aus nationalen Ca-Bentoniten in Kontakt mit Na-reichen Porenwässern potentieller Wirtsgesteine basierend auf den initialen und sich ändernden Randbedingungen, Hydratationsbedingungen und physiko-chemischen Bentoniteigenschaften. Damit erfolgt der Skalenübergang von der molekularen auf die makroskopische Ebene. Das Vorhaben trägt dazu bei, die Frage zu beantworten, ob die Bentonitbarriere einen Gleichgewichtszustand bei $t = \infty$ erreicht, wodurch die Ermittlung des Gesamtverhaltens des Systems im SANDWICH-Hauptprojekt verbessert wird. Das Projekt ist ein Verbundprojekt zwischen KIT und RUB. Die Projektleitung liegt bei KIT.

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

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

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

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

AP4: Koordination/Berichtswesen (KIT)

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1: Die quellfähigen Tonminerale im Calcigel als auch Secursol UHP wurden als Ca/Mg-belegte niedriggeladene tv/cv eisenhaltige montmorillonitische Beidellite charakterisiert, wobei die tetraedrische Ladung nur geringfügig die oktaedrische Ladung überwiegt. Der Durchmesser des Smectits im Calcigel ist ca. 30% größer als im Secursol UHP. Mittels DFT (density functional theory) Berechnungen wurden das Elementarzellenvolumen und die daraus resultierende spezifische Dichte für wasserfreie homoionische Montmorillonite (Na, Ca, M, K-Form) verschiedener Schichtladungen als Grundlage für die Sättigungsberechnung kompaktierter Bentonite berechnet. Zudem wurde der Bulk Modulus (C_{33}) berechnet. Dabei ist der Bulk Modulus von Na-gesättigten Montmorillonit ca. 1,5-2x höher als bei Ca- oder Mg-gesättigten Montmorilloniten und ca. 4x höher als bei K-gesättigten Montmorilloniten (alle im wasserfreien Zustand). Die Berechnungen der Hydratationszustände ist noch nicht abgeschlossen. Derzeit werden Hydratationsisothermen mittels Röntgenbeugung zur Änderung der Zwischenschichtporosität gemessen. Die Wasseraufnahme in der Zwischenschicht und damit Erhöhung der Zwischenschichtporosität im Calcigel nach einem Quelldruckversuch in den μ CT Quelldruckzellen wurde mittels Röntgenbeugung durch Verschiebung des Basisabstandes von 15.8 zu 19.2 Å gemessen. Quelldruckversuche mit homoionischen Proben werden durchgeführt.

AP2: siehe Bericht RUB zu Teilprojekt B (02E12001B)

Die Kationenaustauschkapazität sowie die elektrische Leitfähigkeit in dispergierten Proben vom Fuß (Abschnitt3) des Säulentests ist leicht erhöht im Vergleich zum Einbaumaterial. Insbesondere der Anteil löslichen Mg^{2+} sowie des während der KAK-Messung löslichen Mg^{2+} und Ca^{2+} ist über die gesamte Länge des Säulenversuches erhöht.

AP3: siehe Bericht RUB zu Teilprojekt B (02E12001B). Der Beitrag der Zwischenschichtporosität zur Gesamtporosität als dritte Porosität, die das Doppelporositätsmodell erweitert und präzisiert (siehe AP1)

AP4: Der Projektstand und Publikationen (siehe auch Bericht RUB zu Teilprojekt B02E12001B) wurden abgestimmt. Zudem findet ein kontinuierlicher Austausch mit dem Sandwich-HP2 (02E11799A/B/C) auch durch gemeinsame Projektmeetings statt.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP1: Quelldruckmessungen an homoionischen Tonfraktionen von Calcigel und Secursol UHP mit Bestimmung der Porositätsänderung, Auswertung Hydratationsisothermen

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

5. Berichte, Veröffentlichungen

Asaad, A. et al. (2025) Mineralogical and geotechnical characterization of two German bentonites from Westerwald and Bavaria. <https://doi.org/10.1016/j.clay.2025.107901>

Antragssteller(in) / ausführende Stelle: Ruhr-Universität Bochum (RUB) Lehrstuhl für Bodenmechanik, Grundbau und Umweltgeotechnik		Förderkennzeichen: 02 E 12001B
Vorhaben (Thema/Titel): Verbundvorhaben: Sandwich Support Projekt 1: Heterogene Bentonithydratation (Sandwich-SP1), Teilprojekt B		
Themenbereich des Fördervorhabens: C2.3 Geotechnische und technische Barrieren		
Laufzeit des Vorhabens: 01.12.2021 bis 31.12.2025	Berichtszeitraum: 01.01.2025 bis 30.06.2025	
Gesamtkosten des Vorhabens: 268.932,00 EUR	Projektleitung: 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 potenzieller 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: siehe Bericht KIT zu Teilprojekt A (02 E 12001A)

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 Wiederinbetriebnahme der Versuchstechnik soll im dritten Quartal 2025 erfolgen. Der zweite Säulenversuch (Secursol UHP) wurde im November 2024 erfolgreich eingebaut und wird seit knapp 9 Monaten bewässert. Während der Infiltration werden die Entwicklung der axialen und radialen Spannung (Quell-druck), relativen Feuchte, Temperatur, Wassergehalt gemessen. Auch für den zweiten Säulenversuch ist eine Infiltrationszeit von einem Jahr bis November 2025 und anschließende experimentelle Untersuchungen an der ausgebauten Probe geplant.

AP3: Die Nachrechnung der Elementversuche (Ödometerversuche / 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: Wiederaufnahme der saugspannungskontrollierten Versuche und Fortsetzung des Monitorings des zweiten Säulenversuches (Secursol UHP) bis November 2025.

Geplante Untersuchungen zur Porengrößenverteilung an den nach Versuchsausbau entnommenen Proben verzögerten sich, da das an der Fakultät vorhandene Gerät defekt war. Diese Untersuchungen sollen im zweiten Halbjahr 2025 nachgeholt werden.

Vortrag im Rahmen der AIPEA - 18th International Clay Conference (Trinity College, Dublin, Ireland, July, 13t-18th, 2025) „Effect of boundary conditions and heterogeneities on the hydromechanical behaviour of two German bentonites“

AP3: Vervollständigung der Simulation beider Säulenversuche.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Im Nachgang der Clay Conference 2024 in Hannover (11/24) wurde folgendes Manuskript im zugehörigen Special Issue bei Applied Clay Science eingereicht: Nitsch et al.; Swelling behaviour of compacted Ca/Mg bentonite during hydration on different scales, Applied Clay Science, Under Review.

Antragssteller(in) / ausführende Stelle: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 12012A
Vorhaben (Thema/Titel): Weiterentwicklung von d ^{3f++} : Hydrogeologische Modellierung im regionalen Maßstab (HYMNE II)		
Themenbereich des Fördervorhabens: 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 31.01.2026		Berichtszeitraum: 01.01.2025 bis 30.06.2025
Gesamtkosten des Vorhabens: 1.915.790,00 EUR		Projektleitung: A. Schneider

3. 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.

4. 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 Kluftnetzwerk
- 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 funktioniert jetzt auch für den 3d Fall. Die Darstellung der Schnittbereiche als jeweils ein einziges Element ist in Arbeit. Diese Anforderung war im Laufe des Projektes entstanden.
- AP 2.1 Die Arbeit an den Permafrost-Modellen und die Analyse der Ergebnisse wurden erfolgreich fortgesetzt. Die Ursachen für die Abweichung der d^{3f++} Modelle (mit Salinitätseinfluss) von den INTERFROST-Ergebnissen (ohne Salinitätseinfluss) wurden identifiziert.
- AP 4.1 Modelle aus der PA-Task Crystalline aus DECOVALEX23: Im Rahmen der nachholenden Arbeiten wurde für den 4-Fracture Benchmark der Tracertransport mit Zerfall und Sorption mit sehr guter Übereinstimmung berechnet. Für den Reference Case wurden Strömungs- und erste Transportrechnungen durchgeführt. Die Ergebnisse wurden auf dem DECOVALEX27 Workshop am 8.4.2025 (online) präsentiert.
- AP 4.2 Basierend auf Berichten von SKB wurde ein geologisches Modell aufgebaut und darauf basierend ein DFN-Modell erzeugt.
- AP 4.3 Verschiedene Modellansätze für das Laborexperiment, die Levelset-Methode und das Phasenfeld-Modell, wurden miteinander verglichen und analysiert.
- AP 4.4 Mit der Modellverfeinerung und der Anwendung des Phasenfeldmodells wurde begonnen.
- AP 5 Durch das Einbinden einer neuen Version des Gittergenerators Tetgen wurde die Qualität der Rechengitter verbessert und das Präprozessing stark beschleunigt.
- AP 6 Das dritte Projektstatusgespräch fand am 12./13.6.2025 in Präsenz in Braunschweig statt.

4. Geplante Weiterarbeiten

- AP 1.1 Fertigstellung der Implementierung des 3d Algorithmus zum Extrudieren von Klüften für die Schnittbereiche.
- AP 1.2 Optimierung der Abbildung stochastisch erzeugter Permeabilitäts- und Porositätsfelder.
- AP 2.1 Die Modellrechnungen und Analysen zur Berücksichtigung der Salinität bei den Phasenübergängen und werden dokumentiert.
- AP 4.1 Für den 4-Fracture Benchmark werden der Transport von Nuklidketten und der Receptor Well Benchmark berechnet. Die Transportsimulationen für den Reference Case werden vervollständigt. Die nachholenden Arbeiten werden damit abgeschlossen und die Arbeiten für DECOVALEX27 gemäß dem aktuellen Stand der Taskbeschreibung begonnen.
- AP 4.2 Die aus dem DFN abgeleiteten Permeabilitäten und Porositäten werden in Modellierungen eingesetzt. Die Arbeiten werden dokumentiert.
- AP 4.3 Die Arbeiten an der Modellierung des Laborexperimentes werden dokumentiert.
- AP 4.4 Die Modellierung wird abgeschlossen.
- AP 6 Der Abschlussbericht wird erstellt.

5. Berichte, Veröffentlichungen

- Schneider, A., Zhao, H., Wolf, J., Logashenko, D., Reiter, S., Howahr, M. Eley, M., Langmann, T., Wiederhold, H.: Modeling saltwater intrusion scenarios for coastal aquifers in northern Germany and Turkey, 28th Saltwater Intrusion Meeting, Barcelona, 05.06.2025
- Schneider, A., Zhao, H., Logashenko, D., Wang, J., Nägel, A., Knodel, M., Wittum, G.: Modeling Groundwater Flow and Nuclide Transport in Fractured Media with d^{3f++}, LSSC 25, Sozopol, 19.06.2025

Antragssteller(in) / ausführende Stelle: Johann Wolfgang Goethe-Universität Frankfurt am Main		Förderkennzeichen: 02 E 12012B
Vorhaben (Thema/Titel): Verbundprojekt: Weiterentwicklung von d ^{3f++} : Hydrogeologische Modellierung im regionalen Maßstab (HYMNE II), Teilprojekt B		
Themenbereich des Fördervorhabens: 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: 01.01.2025 bis 30.06.2025
Gesamtkosten des Vorhabens: 779.892,00 EUR		Projektleitung: 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 UnterAntragssteller(in) / ausführende Stelle:in der GRS. Das Verbundprojekt ist ein Folgevorbahn 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) ^{[L]_{SEP}}

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

Die zeitparallelen Verfahren wurden erweitert und unterstützen nun auch Mehrgitter-Hierarchien in Raum und Zeit. Dazu wurde die Transferfunktion so erweitert, dass ein gleichzeitiger Transfer zwischen verschiedenen Zeit- und Raumgittern möglich ist. Dafür kann zum einen der Standard Transfer (Kanonische Prolongation / Restriktion), sowie die Injektion verwendet werden. Die Tests mit einfachen Gleichungen wie der Wärmeleitung zeigen gute Konvergenzraten in frühen Iterationen, jedoch eine schlechtere Konvergenzrate bei späteren Iterationen im Vergleich zu der Methode ohne Vergrößerung des Raumgitters. Bei gekoppelten Systemen wie der linearen Poroelastizität treten durch den räumlichen Transfer Inkonsistenzen auf, die mit CF-Relaxationen teilweise geglättet werden können – jedoch mit erhöhtem Rechenaufwand und insgesamt schlechterer Konvergenzgeschwindigkeit. Für eine Anwendung fehlt derzeit ein Glätter, welcher nach dem Transfer angewendet werden kann. Zudem wurde das Verfahren für das Lösen nichtlinearer Probleme erweitert. Als Test diente ein System von Reaktions-Diffusions-Gleichungen. Die starken Dynamiken und die scharf ausgeprägten Wellenfronten zeigen, dass an die Wahl der Zeitgitterhierarchie und Verfahrensparameter hohe Anforderungen gestellt werden müssen. Nichtlinearitäten führen zu größeren Korrekturen innerhalb der MGRIT-Iterationen, wodurch die Konvergenz zwar ungleichmäßig, aber dennoch insgesamt lösungsverbessernd verläuft.

Im Rahmen der Arbeiten zur Modellierung haliner Strömungen und Transportsysteme wurde die bestehende Elementdiskretisierung für haline Strömungen auf ungesättigte Strömungen erweitert. Dabei wurde die Richards-Gleichung implementiert, um Wasserbewegungen in der vadosen Zone zu erfassen. Die Diskretisierung der Transportgleichung wurde ebenfalls angepasst, um mit den ungesättigten Strömungen konsistent zu sein. Eingeführt wurde ein druckabhängiger Sättigungsfaktor, der das effektive Wasservolumen in einem Referenzelement beschreibt, sowie ein sättigungsabhängiger Permeabilitätsfaktor (relative Permeabilität). Beide Größen werden nach dem van-Genuchten-Mualem-Modell berechnet. Um scharfe Übergänge zwischen vadosen und gesättigtem Bereich behandeln zu können, wird die relative Permeabilität nicht an Subkontrollvolumenkanten, sondern an Knoten in Upwind-Richtung zur Darcy-Geschwindigkeit ausgewertet. Dies verbessert die Stabilität des Lösungsverfahrens in stark nichtlinearen Bereichen. Die Implementierung der Richards-Gleichung wurde in Kombination mit Schadstofftransport anhand eines Säulentestfalls validiert. Dabei wurde ein 9 m hohes (effektiv eindimensionales) Säulenmodell mit gesättigter und ungesättigter Zone, einem Schadstoffdepot sowie variierenden Parametern (Diffusion, Dispersion, Kd-Werte) gerechnet. Die Ergebnisse wurden mit den Softwarepaketen SPRING und DuMuX verglichen und zeigen gute Übereinstimmungen, vor allem mit SPRING. Ein Skript für einen 2D Testfall einer

Schadstoffdeponie wurde konstruiert und wird weiterverfolgt.

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

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*. *Comput Geosci* 29, 27 (2025).

<https://doi.org/10.1007/s10596-025-10367-5>

Rebecca Wittum, Arne Nägel, Dmitry Logashenko, Gabriel Wittum: *Numerical Simulation of Phase Transitions for Saline Groundwater Flow in Soils with Permafrost*, *LSSC Conference Proceedings 2025*, Springer (zur Publikation angenommen).

Niclas Conen, Dmitry Logashenko, Arne Nägel, Anke Schneider, Gabriel Wittum, Hong Zhao:

Simulation of Haline Flow in Large Scale Unsaturated Aquifers, *International Journal of Geomathematics* (eingereicht)

Antragssteller(in) / ausführende Stelle: TU Clausthal Lehrstuhl für Geomechanik und multiphysikalische Systeme		Förderkennzeichen: 02 E 12022A
Vorhaben (Thema/Titel): Internationales Benchmarking zu Verifizierung und Validierung von TH2M-Simulatoren insbesondere im Hinblick auf fluiddynamische Prozesse in Endlagersystemen – Erweiterung auf multiphysikalische Ansätze und mehrdimensionale Modellgeometrien		
Themenbereich des Fördervorhabens: 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: 01.01.2025 bis 30.06.2025
Gesamtkosten des Vorhabens: 523.623,00 EUR		Projektleitung: TU Clausthal, 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 sechzehn Treffen durchgeführt. Es wurden sehr geringfügige Änderungen an den bisher bestehenden Modellen im Vergleich zu dem vorangegangenen Berichtszeitraum vorgenommen.

Zusätzlich zu den Projekttreffen wurden in einem kleinen Kreis unter den Projektpartnern technische Treffen durchgeführt, bei denen die noch bestehenden Diskrepanzen bei den Ergebnissen von Model 1.4 (TH²M) diskutiert und analysiert wurden.

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 im letzten Berichtszeitraum Varianten mit einem anisotropen Wirtgestein definiert und die diskutierten anisotropen TH²M-Parameter und Modelle wurden unter Absprache mit den Partnern angepasst.

Für Model 3.1 (isotrop) und (anisotrop) (TM) sind bereits von allen Partnern Berechnungsergebnisse eingegangen. Für die weiteren Varianten des Models liegen von mehreren Projektpartnern ebenfalls Berechnungsergebnisse vor.

Model 2, das in dem letzten Berichtszeitraum nach Rücksprache mit den Partnern in ein 3-D Model umwandelt wurde, wurde in mehreren Iterationen verfeinert. Analog zu Model 3 wurden die entsprechenden Szenarien definiert. Für Model 2.1 (TM) liegen bereits die Berechnungsergebnisse mehrerer Partner vor.

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.

Bei den technischen Treffen, bei den die Partner TUC, BGR und GRS teilnahmen, wurden aufbauend auf Model 1.4 (TH²M) vereinfachte Testszenarien definiert, bei denen zusätzlich der Fokus u.a. auf die Implementierung der Kapillardruckfunktionen und Relativpermeabilitätsfunktionen gesetzt wurde.

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 und ein zentrales Ziel bleiben. Das in dem vorliegenden Berichtszeitraum initiierte Format der technischen Treffen hat sich als zielorientiert herausgestellt und soll auch fortgesetzt werden.

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

5. Berichte, Veröffentlichungen

Noch keine vorhanden.

Antragssteller(in) / ausführende Stelle: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 12022B
Vorhaben (Thema/Titel): Benchmarking for Verification and Validation of TH ² M Simulators with special regard to fluid dynamic processes in repository systems – physical and geometrical enlargements (BenVaSim-II)		
Themenbereich des Fördervorhabens: C3.1: Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-) Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung		
Laufzeit des Vorhabens: 01.02.2023 bis 30.09.2026		Berichtszeitraum: 01.01.2025 bis 30.06.2025
Gesamtkosten des Vorhabens: 524.847,00 EUR		Projektleitung: Larissa Friedenberg

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

AP 1: Entwicklung generischer Simulationsmodelle und Definition von Parametersätzen

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

AP 2: Durchführung und Bewertung von Modellrechnungen

Die in AP1 entwickelten Modelle und Szenarien sollen in diesem Arbeitspaket angewendet werden. Hierbei 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 vier virtuelle Meetings (22.01., 24.02., 23.04., 27.05.) mit allen Projektpartnern sowie drei technische Diskussionen (29.04. und 12.06. virtuell sowie 10.06. bei der BGR in Hannover) zwischen TUC, BGR und GRS statt. In den Meetings wurden Ergebnisse zu den bisher bearbeiteten Modellen verglichen und diskutiert. Insbesondere wurden neben der Weiterentwicklung des eindimensionalen (Modell 1.4) und zweidimensionalen Problems (Modell 3) auch für das dreidimensionale Modell 2 erste Ergebnisse erzielt und verglichen. Für dieses Modell werden die Simulationen (wie schon bei Modell 3) mit steigender Komplexität (TM, TH, TH², THM, TH²M) durchgeführt.

Beim Ergebnisvergleich für das eindimensionale Modell 1.4 konnte der Einfluss der unterschiedlichen Implementierung von Fluideigenschaften auf Unterschiede zwischen den Simulationsergebnissen weitestgehend ausgeschlossen werden. Zur weiteren Untersuchung der Ergebnisunterschiede wurden in den technischen Diskussionen ausgehend von Modell 1.4 (TH²M) vereinfachte Testszenarien hergeleitet. Die Testszenarien fokussieren sich auf den Einfluss von Materialgrenzen, Retentionsverhalten und relativen Permeabilitätsbeziehungen. Die Auswertung der Ergebnisse ist noch nicht vollständig abgeschlossen.

Für das zweidimensionale Modell (Modell 3) wurden Ergebnisse der TH- und TH²-Simulation modifiziert und für das neu aufgesetzte dreidimensionale Modell (Modell 2) wurde eine TM-Simulation durchgeführt und durch Ergebnisvergleiche iterativ verbessert.

Die bisherigen Ergebnisse der Simulationen mit CODE_BRIGHT wurden auf dem CODE_BRIGHT-Workshop am 04.06.2025 in Barcelona präsentiert.

4. Geplante Weiterarbeiten

Bearbeitung der einzelnen APs entsprechend der Vorhabensbeschreibung.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Hinze, M. & Friedenberg, L. (2025): Simulation of THM processes for a generic HLW repository. CODE_BRIGHT-Workshop, Barcelona, 04.06.2025.

Antragssteller(in) / ausführende Stelle: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 12032
Vorhaben (Thema/Titel): Methoden zur experimentellen und numerischen Analyse der geologischen Barriere eines Endlagers in tonreichen Sedimentgesteinsformationen (MAGNUS)		
Themenbereich des Fördervorhabens: 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: 01.01.2025 bis 30.06.2025	
Gesamtkosten des Vorhabens: 1.462.465,00 EUR	Projektleitung: Dr. Marvin Middelhoff	

1. Vorhabensziele / 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 (Manicá-Modell), einschließlich der Berücksichtigung eines qualifizierten Eingangsparametersatzes, reproduziert werden kann.

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

Probenahme und Probelagerung (AP 1): 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.

Methodenentwicklung zur experimentellen Analyse im REV-Maßstab (AP 2): 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 durchgeführt. Das Ziel des UAP 2.2 ist die Generation der physikalischen Eingangsparameter für das Manicá-Modell.

Methodenentwicklung zur numerischen Analyse in multiplen Maßstäben (AP 3): 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 Manicá-Modell verwendet, um die zuvor durchgeführten Experimente unter Berücksichtigung der Initial- sowie Randbedingungen zu reproduzieren. Während der Reproduktion der Experimente werden die numerischen Eingangsparameter ermittelt und der Eingangsparametersatz für den REV-Maßstab qualifiziert. Im Rahmen des UAP 3.2 wird der Eingangsparametersatz in Verbindung mit dem Manicá-Modell zur Verbesserung der Simulationen von In situ-Experimenten verwendet.

Dokumentation (AP 4): Es werden in dem AP die Ergebnisse der Arbeitspakete dokumentiert und zusammengefasst sowie verbleibenden Fragenstellungen synthetisiert.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Es ist im Rahmen des **UAP 1.1** das MMB-Experiment in der OPA-S durchgeführt worden. 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. 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). 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, die senkrecht und in einem Winkel von 45° zur Schichtung orientiert sind, sind im Berichtszeitraum berücksichtigt worden. Im Rahmen des **UAP 2.2** sind erste physikalische Eingangsparameter für das Manicá-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 Rahmen des **UAP 3.2** ist überprüft worden, ob das numerische Modell, welches das SANDWICH-In-Situ-Experiment repräsentativ abbildet, in Verbindung mit dem Manicá-Modell und dem für Callovo-Oxfordian-Tonstein qualifizierten Eingangsparametersatz lauffähig ist.

4. Geplante Weiterarbeiten

Bedeutende Schwierigkeiten bzw. Probleme führen zu einem verzögerten Anlaufen der Arbeiten in AP 2. Es besteht daher die Notwendigkeit der gleichzeitigen Bearbeitung der UAP.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Middelhoff, Marvin. GRS PE-Type I and -Type II canisters: Two new canisters for transport and (long-term) storage of cores from clay-rich sedimentary rock formations. Posterpräsentation, Mont Terri Technical Meeting TM-42, Porrentruy, 13. Mai 2025

Antragssteller(in) / ausführende Stelle: BGE TECHNOLOGY GmbH		Förderkennzeichen: 02 E 12042A
Vorhaben (Thema/Titel): 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		
Themenbereich des Fördervorhabens: C3.2: Methodische Grundlagen der Nachweisführung C3.3: Werkzeuge der Sicherheitsanalysen		
Laufzeit des Vorhabens: 01.11.2022 bis 31.10.2026		Berichtszeitraum: 01.01.2025 bis 30.06.2025
Gesamtkosten des Vorhabens: 576.874,19 EUR		Projektleitung: 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: Im Berichtszeitraum wurden abweichende Entwicklungen des Endlagersystems abgeleitet. Dafür wurden drei verschiedene methodische Ansätze genutzt: Abweichungen von spezifischen Annahmen, abweichende Ausprägungen von Initial-FEP und abweichende Initial FEP. Dabei wurde die neu in CHRISTA-III entwickelte Methodik zur Ableitung von Entwicklungen an praktischen Beispielen erprobt. Die Methodik basiert im Wesentlichen auf einem spezifischen FEP-Katalog und Initialgruppen, die wichtige Barrierensysteme und ihr Umfeld beschreiben. Generell stellen die abweichenden Entwicklungen stets Differenzbetrachtungen zur erwarteten Entwicklung dar. Entwicklungen, die mit unterschiedlichen methodischen Ansätzen abgeleitet wurden, können unterschiedliche Ursachen haben, aber zu ähnlichen Konsequenzen für das Endlagersystem führen, etwa dem Ausfall der Barriere. Solche Entwicklungen werden in gemeinsamen Referenzentwicklungen zusammengefasst. Die Abschlussdiskussion der Ergebnisse des AP 1 hat gezeigt, dass die exemplarische Anwendung des neuen methodischen Ansatzes zu sinnvollen Ergebnissen bei der Ableitung von möglichen zukünftigen Entwicklungen eines Endlagers im Kristallingestein führt.

AP3: Die BGETEC beteiligt sich an DECOVALEX-27 (PA-Crystalline Task), um ihre Modellierungswerkzeuge im Kristallin weiterzuentwickeln. Die Arbeiten gliedern sich in Benchmarks mit unterschiedlichen Problemstellungen. Der erste Benchmark basiert auf einem Benchmark aus DECOVALEX-23 und wird um die Quantifizierung von Ungewissheiten und Sensitivitätsanalysen erweitert. Grundlage ist ein Einzelkluftmodell nach Tang et al. (1981), wobei die Tracerkonzentration an einem Punkt, 2m entfernt vom Rand, untersucht wird. Drei Parameter Fließgeschwindigkeit, Retardationskoeffizient und Tortuosität werden variiert und ihre Auswirkung auf die Konzentration mithilfe von Scatterplots und Korrelationskoeffizienten analysiert. Es zeigt sich eine positive Korrelation mit der Fließgeschwindigkeit und eine negative mit dem Retardationskoeffizienten und der Tortuosität. In weiteren Benchmarks sind kleinräumige stochastische Klüfte zu berücksichtigen. Dafür hat die BGETEC ein Python-Script entwickelt, das auf dem Oda-Upscaling-Ansatz beruht, aber nicht mehr auf regelmäßig äquidistanten Gittern beschränkt ist, sondern auf beliebig geformten Gittern funktioniert (z. B. beliebig geformte Hexaeder oder Tetraeder). Dieser Upscaling-Ansatz soll im Rahmen der weiteren Benchmarks getestet und verwendet werden.

4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1: Es ist vorgesehen, die Vorgehensweise und die Ergebnisse des AP 1 umfassend im Abschlussbericht zu dokumentieren
- 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.
- AP3: Durchführung weitere DECOVALEX Benchmarks und Validierung der entwickelten Upscaling-Routine.
- 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

keine

Antragssteller(in) / ausführende Stelle: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 12042B
Vorhaben (Thema/Titel): Verbundprojekt: Erarbeitung einer Methodik zur systematischen Ableitung von zu erwartenden und abweichenden Entwicklungen im Kristallingestein in Deutschland und exemplarische Anwendung als Grundlage zur Bewertung des sicheren Einschlusses unter Berücksichtigung von Optimierungsmaßnahmen (CHRISTA-III), Teilprojekt B		
Themenbereich des Fördervorhabens: C3.2: Methodische Grundlagen der Nachweisführung C3.3: Werkzeuge der Sicherheitsanalysen		
Laufzeit des Vorhabens: 01.11.2022 bis 31.12.2027		Berichtszeitraum: 01.01.2025 bis 30.06.2025
Gesamtkosten des Vorhabens: 872.318,60 EUR		Projektleitung: Kim-Marisa 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

AP1: Die abweichenden Entwicklungen am Beispiel des mKBS-3-Konzeptes wurde abgeleitet und diskutiert. Der Bericht zur Darlegung der Entwicklungen wurde bei einem Treffen am 20.3. diskutiert und letzte offene Punkte identifiziert.

AP2: Es erfolgten Anpassungen des CLAYPOS Codes. Anschließend war es erforderlich einige Rechenfälle zu wiederholen. Es wurde mit dem Schreiben des Berichtes begonnen.

AP3: Ein Paper zur stochastischen Modellierung von Klüften wurde veröffentlicht. Es wurden Unternehmungen begonnen Claypos Rechnungen des Nahfelds aus AP 2 in das OGS-Modell mithilfe eines neu aufgesetzten Skripts zu übernehmen.

Teilnahme an Decovalex-2027 im Task F: PA Crystalline: Auf dem virtuellen Workshop vom 7.-11.4. wurden die mit dem Open Source Code d3f++ aufgestellten Ergebnisse präsentiert. Diese umfassen verschiedene Benchmark-Fälle mit einer bzw. vier Klüften und dem Transport eines einfachen Tracers, eines zerfallenden sowie eines sorbierenden Tracers. Zusätzlich wurde für den einfachen Benchmark eine Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse vorgenommen.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP1: Es ist geplant den Bericht zum FEP-Katalog fertigzustellen. Er enthält für das mKBS-3-Konzept auch aktualisierte FEP sowie FEP-Abhängigkeiten und eine Beschreibung des Aufbaus des FEP-Katalogs und der Datenbank.

AP2: Es ist geplant, die Sensitivitätsanalyse weiter auszubauen und eine Kombination mit einem überlagernden Deckgebirge zu betrachten.

AP3: Es ist geplant, die durchgeführten Arbeiten zu dokumentieren. Der Versuch, der Weiterverwendung der Claypos Ergebnisse für das 3-D Modell wird weiterverfolgt, da auf diese Weise realistische Radionuklid-Konzentrationen betrachtet werden können.

Teilnahme an Decovalex-2027 im Task F: PA Crystalline: Das Referenzmodell bestehend aus sechs Hauptklüften und stochastischem Kluftnetzwerk soll fertiggestellt werden und das Szenario eines Behälterausfalls nachmodelliert werden. Außerdem sind für den Benchmark mit vier Klüften noch weitere Arbeiten auszuführen. Die Ergebnisse sollen auf dem Workshop in Berkeley im November diskutiert werden.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Zheng, Z.; Wang, X.; Flügge, J.; Nagel, T. (2025): A stochastic modeling framework for radionuclide migration from deep geological repositories considering spatial variability, *Advances in Water Resources*, 203, 105003. DOI: 10.1016/j.advwatres.2025.105003

Antragssteller(in) / ausführende Stelle: Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e.V., Bautzner Landstrasse 400, 01328 Dresden		Förderkennzeichen: 02 E 12052A
Vorhaben (Thema/Titel): Konkurrenz und Reversibilität bei Sorptionsvorgängen (Teilprojekt HZDR im Verbundvorhaben KuRSiv)		
Themenbereich des Fördervorhabens: C1.1 Geowissenschaftliche und geo-technische Methoden zur Standorterkundung (Feld und Labor) C1.2 Charakterisierung des Geosystems und Geosynthese C1.3 Methodische Grundlagen eines Standortvergleichs		
Laufzeit des Vorhabens: 01.01.2023 bis 30.06.2026		Berichtszeitraum: 01.01.2025 bis 30.06.2025
Gesamtkosten des Vorhabens: 557.539,00 EUR		Projektleitung: 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: EXAFS-Untersuchungen zur Struktur gebildeter Ga-Oberflächenkomplexe
Sorptionsversuche von Al^{3+} und Ga^{3+} an Hämatit im niedrigen pH-Bereich, weitere Aufklärung der kompetitiven Sorption von Eu^{3+} (1 μM) und Al^{3+} (100 μM) an Hämatit
Manuskriptentwürfe zur Sorption von Al^{3+} und Ga^{3+} an Hämatit, sowie zur kompetitiven Sorption mit Eu^{3+}
- AP3: Reflektivitätsmessungen zur Wiederholung verschiedener Th-Konzentrationen in Abwesenheit von Nitrat wurden in Grenoble an der ESRF (ROBL Beamline) sowieso die Untersuchung von Al(III) (bzw. Ga(III)) unter verschiedenen Bedingungen (Konzentration, pH, Reaktionszeit) durchgeführt
Auswertung der Reflektivitätsmessungen sowie AFM-Messungen in Kombination mit Kraftmessungen. Anfertigung eines Manuskripts zum Einfluss von Al^{3+} auf die Orthoklas-Oberflächeneigenschaften (Kombinierung von AFM- und SXD-Messungen)
AFM Untersuchung verschiedener Th-Konzentrationen an Muskovit in Abwesenheit von Nitrat (*ongoing*)
- AP5: Aufbauend auf den Ergebnissen der EXAFS Messungen Entwicklung eines thermodynamischen Modells zur Sorption von Ga^{3+} als Analog für Al^{3+} an Hämatit.
- AP7: Teilnahme am Workshop „Thermodynamic Modelling Workshop on Reactive Transport“ in Braunschweig / GRS

4. Geplante Weiterarbeiten

- AP2: Sorptionsversuche mit Al-26 an K-Feldspat
Genauere Charakterisierung der Bildung möglicher Al-Sekundärphasen oder Al-Fe-Festkörperlösungen mithilfe verschiedener Methoden (XPS, Al-NMR, Mikroskopie)
Weiterführende Arbeiten an Manuskripten
- AP3: AFM Untersuchung verschiedener Th-Konzentrationen in Abwesenheit von Nitrat (*abschließen*)
Finale Auswertung der Reflektivitätsdaten
- AP7: Vorbereitung des 2.Workshop „Thermodynamic Modelling Workshop on Reactive Transport“ am HZDR in 2026
Projekttreffen am HZDR (9.-10.12.2025)

5. Berichte, Veröffentlichungen

Lessing, J.; Hilpmann, S.; Bok, F.; Lützenkirchen, J.; Neumann, J.; Schmidt, M.; Brendler, V. “Building the Bridge: From Sorption Data to Surface Complexation Models” Vortrag, Workshop on thermodynamic modeling, 12.-14.05.2025, Braunschweig, Deutschland

Antragssteller(in) / ausführende Stelle: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 12052B
Vorhaben (Thema/Titel): Konkurrenz und Reversibilität bei Sorptionsvorgängen (Teilprojekt GRS im Verbundvorhaben KuRSiv)		
Themenbereich des Fördervorhabens: C1.1 Geowissenschaftliche und geo-technische Methoden zur Standorterkundung (Feld und Labor) C1.2 Charakterisierung des Geosystems und Geosynthese C1.3 Methodische Grundlagen eines Standortvergleichs Relevant für alle Wirtsgesteine		
Laufzeit des Vorhabens: 01.01.2023 bis 30.09.2026		Berichtszeitraum: 01.01.2025 bis 30.06.2025
Gesamtkosten des Vorhabens: 765.859,00 EUR		Projektleitung: 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: Durchführung von umfangreichen Batch-Versuchen zur Al Sorption an Quarz sowie zur Konkurrenz von Al und Eu an Quarz. Verschiedene Ionenstärken, Feststofflöslichkeitsverhältnisse, Al- sowie Eu-Konzentrationen wurden angewendet und Sorptionskanten ermittelt. Die Daten wurden ausgewertet und aufgearbeitet.

AP5: Vom 12. – 14.05.25 hat in Braunschweig der „Workshop on thermodynamic modeling: Connecting Theory and Application – Tackling Challenges in Surface Complexation and Reactive Transport“ stattgefunden. Es haben 22 Teilnehmer aus Deutschland, den USA und Niederlanden teilgenommen. Es gab umfangreiche Diskussionen zu neusten Entwicklungen im Themenbereich des reaktiven Stofftransport von Radionukliden im Untergrund inkl. verschiedener Modellansätzen (smart Kd, aber vor allem mechanistische Modellansätze mit PHREEQC, FITEQL, GWB, Orchestra etc.). Hauptsächlich wurde das Themengebiet der Endlagerung von HLW adressiert, aber Themen der Radioökologie zur Freigabe von oberirdischer Lagerung von L/ILW in der Ukraine und die Aufnahme von Radionukliden im Körper mit den entsprechenden Modellansätzen wurden ebenfalls thematisiert.

AP7: Es konnte eine Masterstudentin der TU Braunschweig für das Thema gewonnen werden, die sich derzeit mit Laborversuchen sowie mechanistischen Modellansätzen zur Konkurrenz von Al und Eu beschäftigt. Der Lehrauftrag an der TU Clausthal mit der Vorlesung „Mobilisierung und Migration von Radionukliden im Untergrund“ wurde erneut vergeben und erfolgreich fortgesetzt. Das vierte Projekttreffen hat erfolgreich in Braunschweig stattgefunden.

4. Geplante Weiterarbeiten

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

Im Rahmen einer Masterarbeit werden Säulenversuche mit Quarz und Al sowie Eu durchgeführt, ggf. können Säulenversuche mit Orthoklas gestartet werden.

AP4: Abschluss der potentiometrischen Titrationsen mit Quarz (G20 EAS extra, < 63 µm) werden angestrebt.

AP5: Es ist geplant, in Zusammenarbeit mit den Partnern, die experimentellen Daten mit PhreeqC in Kopplung mit UCODE auszuwerten.

5. Berichte, Veröffentlichungen

- Britz S., Becker D.-A., Fricke J. et al.: Surface complexation parameter determination and best guesses, Workshop on thermodynamic modeling: Connecting Theory and Application – Tackling Challenges in Surface Complexation and Reactive Transport, oral presentation, GRS, Braunschweig, Mai 2025.
- Fricke J.: Surface complexation and reactive transport modeling of experiments with Ni and quartz, Workshop on thermodynamic modeling: Connecting Theory and Application – Tackling Challenges in Surface Complexation and Reactive Transport, oral presentation, GRS, Braunschweig, Mai 2025.

Antragssteller(in) / ausführende Stelle: Karlsruher Institut für Technologie (Großforschungsaufgabe) Institut für Nukleare Entsorgung		Förderkennzeichen: 02 E 12052C
Vorhaben (Thema/Titel): Konkurrenz und Reversibilität bei Sorptionsvorgängen (Teilprojekt KIT im Verbundvorhaben KuRSiv)		
Themenbereich des Fördervorhabens: C1.1 Geowissenschaftliche und geotechnische Methoden zur Standorterkundung (Feld und Labor) C1.2 Charakterisierung des Geosystems und Geosynthese C1.3 Methodische Grundlagen eines Standortvergleichs		
Laufzeit des Vorhabens: 01.01.2023 bis 30.06.2026		Berichtszeitraum: 01.01.2025 bis 30.06.2025
Gesamtkosten des Vorhabens: 473.763,00 EUR		Projektleitung: 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

AP 4: Es wurde ein Prototyp für die kombinierte Messung von Strömungspotential und QCM mit 14 mm Durchmesser erstellt. Das Design wurde gemeinsam mit der Firma Micro-Vacuum erarbeitet, von der auch die QCM gekauft wurde. Derzeit wird die Verwendung des 15 mm

Stempels für die 14 mm Sensoren favorisiert, da letztere besser dann befestigt werden können. In Test-Versuchen mit Standard-Gold-Sensoren wurde in einigen Strömungspotential-Versuchen mit der 14 mm Zelle nach dem Experiment festgestellt, daß sich QCM Sensoren vom Stempel gelöst hatten. Da dies erst am Ende eines Versuchs oder einer Versuchsreihe beobachtbar ist, sind die Daten in solchen Fällen unbrauchbar.

AP 5/6: Zur Entwicklung des Modells wurde ein Four-Layer-Modell für die Adsorption von Europium an Saphir-0001 Einkristallen entwickelt. Dieses System ist eines der vorgeschlagenen Benchmark-Systeme. Das entwickelte Modell beschreibt die vorhandenen Zeta-Potential- und Oberflächen-potential-Daten für dieses System basierend auf MD-Simulationen und CTR-Daten aus der Literatur. Ein analoges Modell zur Aluminium-Adsorption an dieser Fläche ist noch nicht zufrieden-stellend. Allerdings sind hier auch weniger Daten zur Unterstützung des Modells (bspw. MD-Simulationen) vorhanden.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP 3: AFM Untersuchungen an nicht-reagierten und reagierten Proben. Dr. Hosseini-Monjezi hat inzwischen ein Training an einem AFM durchlaufen. Erste AFM Experimente am INE wurden bereits durchgeführt.

Testversuche mit Feldspat-beschichteten QCM Sensoren zeigen, daß es zu Auflösungsreaktionen kommt. Um diese berücksichtigen zu können sollen parallele Versuche mit Pulvern in mixed-flow-Reaktoren durchgeführt werden und mit den entsprechenden elektrokinetischen Untersuchungen (DLS und/oder Strömungspotential) gekoppelt werden, um einen direkten Bezug zu QCM Daten zu erhalten (für die QCM Sensoren ist die tatsächliche Feldspat-Oberfläche nicht bekannt).

AP 4: Durchführung von kombinierten QCM-und-Strömungs-Potential Messungen am Prototypen und a posteriori Charakterisierung. Ergänzende Messungen zu Benchmark-System (Saphir-0001-Fläche).

AP 5/6: Fortsetzung der Modellierungs-Arbeiten.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Investigating K-Feldspar Dissolution Dynamics Using Quartz Crystal Microbalance and Surface Charge Measurements

B Hosseini-Monjezi, J Lützenkirchen

Poster, Goldschmidt 2025 Conference, July, 6-11, 2025, Prague, Czech Republic

Comments on "Part I: determination of a structure/property transformation mechanism responsible for changes in the point of zero change of anatase titania with decreasing"

J Lützenkirchen, B Hosseini-Monjezi, M Kosmulski

RSC advances 15 (22), 17248-17254 (2025)

Metal organic and covalent organic framework-based QCM sensors for environmental pollutant detection and beyond

Z Golshadi, M Dinari, A Knebel, J Lützenkirchen, B Hosseini-Monjezi

Coordination Chemistry Reviews 521, 21616 (2024)

SCM for trivalent cation uptake on the 0001 face of α - Al_2O_3

J Lützenkirchen

ACS Spring 2025, March 23-27, 2025, San Diego, CA. SESSION: Environmental Radiochemistry

Comment on "Zhou et al. Adsorption Behaviors of Lanthanum (III) and Yttrium (III) Ions on Gibbsite. Minerals 2023, 13, 1530"

B Hosseini-Monjezi, J Lützenkirchen

Minerals 14 (11), 1137 (2024)

Antragssteller(in) / ausführende Stelle: Technische Universität Darmstadt, Institut für Angewandte Geowissenschaften, Fachgebiet Ingenieurgeologie,		Förderkennzeichen: 02 E 12062A
Vorhaben (Thema/Titel): Verbundprojekt: Spannungsprognosen – Quantifizierung und Reduzierung von Ungewissheiten mit geomechanisch-numerischen Untergrundmodellen (SQuaRe), Teilprojekt AP3: Ungewissheiten in den Materialparametern, Rand- und initialen Spannungsbedingungen sowie Einfluss der Rechengitterauflösung		
Themenbereich des Fördervorhabens: C1.1 Geowissenschaftliche und geotechnische Methoden zur Standorterkundung (Feld und Labor)		
Laufzeit des Vorhabens: 01.01.2023 bis 31.12.2025		Berichtszeitraum: 01.01.2025 bis 30.06.2025
Gesamtkosten des Vorhabens: 258.500,00 EUR		Projektleitung: Prof. Dr. Andreas Henk, TU Darmstadt

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

Auf der Basis der Ergebnisse der Modellserien zur Untersuchung der Rechengitterauflösung, welche im zweiten Halbjahr 2024 durchgeführt wurden, wurden zusätzliche Modelle erstellt, die auch solverspezifische Elementdefinitionen vergleichen. Dies war notwendig, um besser verstehen zu können, ob spezielle Elementtypen mit reduzierten Integrationspunkten sich von den Ergebnissen klassischer Elementtypen unterscheiden. Es konnte gezeigt werden, dass beim verwendeten kommerziellen Solver Abaqus dies nicht der Fall ist, es also keinen Unterschied macht, ob Elemente mit einem kompletten Satz an Integrationspunkten Verwendung finden, oder mit reduzierten Integrationspunkten. Dies bestätigte die bisherigen Ergebnisse zum Vergleich zwischen Elementen erster oder zweiter Ordnung. Von allen Ergebnissen, die den Einfluss der Rechengitterauflösung untersuchen, wurden entsprechende Darstellungen abgeleitet, die es ermöglichen, einfach zu vergleichen bzw. zu quantifizieren, wie groß der Unterschied der jeweiligen Modellauflösung, der Elementtypen etc. im Vergleich zum Referenzmodell ist. Alle Ergebnisse, die sich mit der Elementauflösung beschäftigen wurden für eine Publikation zusammengefasst.

Zur Abschätzung der Ungewissheiten in den Modellergebnissen wurde eine Methode entwickelt, die es ermöglicht, den Anteil in den Unsicherheiten, der sich aus der Steifigkeit (E-Modul) der Lithologien ergibt, durch den Modellierungsprozess zu erhalten. Dies war notwendig, da klassische Methoden wie eine Monte-Carlo-Simulation aufgrund der langen Rechenzeit der Modelle ungeeignet sind. Die bereits entwickelte Methode (Vergleiche Halbjahresbericht 1. HJ 2024) wurde auf der Basis der Diskussionen bei Projekttreffen und Konferenzen noch einmal überarbeitet. Dabei wurden sehr unwahrscheinliche Kombinationen von Gesteinsparametern mit Randbedingungen aus dem Analyseprozess entfernt. Die resultierenden verkleinerten Ungewissheiten sind in Übereinstimmung mit den Ergebnissen, welche in den aktuellen Bohrungen der NAGRA in der Nordschweiz beobachtet werden können. Die Ergebnisse der Methode flossen bereits in andere Publikationen ein, aber eine klare Dokumentation des Analyseverfahrens war noch ausstehend. Die entsprechende Methode wurde beschrieben und in Kombination mit einem Beispiel in einem Manuskript zusammengefasst, welches aktuell für eine Publikation vorbereitet wird.

Darüber hinaus erfolgten umfangreiche Zuarbeiten zu einer Fragestellung aus dem Teilprojekt AP 4. Dies war notwendig, da eine von der Darmstädter Arbeitsgruppe erstellte Modellgeometrie verwendet wird. Grundsätzlich werden die geomechanisch-numerischen Modelle an modellunabhängigen Daten kalibriert. Bei der Fragestellung wurde untersucht, ab welcher Anzahl von Kalibrierungsdaten es zu keiner signifikanten Verbesserung der Modellvorhersagen mehr kommt. Die Ergebnisse dieser Untersuchung konnten in einem Manuskript zusammengefasst, und von dem Projektpartnern bereits bis in den peer review - Prozess vorangetrieben werden.

4. Geplante Weiterarbeiten

Im zweiten Halbjahr 2025 werden die bereits existierenden Manuskripte zu den Themenfeldern Rechengitterauflösung als auch den Unsicherheiten durch Materialparameter zur Einreichung als Publikation überführt. Weiterhin werden die Ergebnisse des Projektes auf der safeND Konferenz im September 2025 in Berlin vorgestellt.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Die Publikation der reduced basis methode (physik-basierte Methode der künstlichen Intelligenz - AP2) wurde publiziert. Die Publikation, welche die minimal notwendige Anzahl von Kalibrierungsdaten untersucht, wurde von den Projektpartnern am GFZ eingereicht und wurde bereits zum Review angenommen. Die Ergebnisse zur Untersuchung des Einflusses der Meshauflösung auf die Spannungsabschätzung wurden auf der European Geoscience Union (EGU) Konferenz im Mai 2025 vorgestellt.

Antragssteller(in) / ausführende Stelle: GFZ Helmholtz-Zentrum für Geoforschung		Förderkennzeichen: 02 E 12062B
Vorhaben (Thema/Titel): 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		
Themenbereich des Fördervorhabens: 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: 01.01.2025 bis 30.06.2025
Gesamtkosten des Vorhabens: 366.885,00 EUR		Projektleitung: 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 vierten SQUARE Workshops Mitte Februar 2025 am GFZ Potsdam lag der Fokus auf der Diskussion der Ergebnisse zum Einfluss von tektonischen Störungen auf die Ergebnisse der Prognosemodelle, Diskussion der finalen Ergebnisse zu den Arbeiten der Modellkalibrierung und den Abschluss der Revision der grundlegenden Publikation von Denise Degen zur Erstellung und Verwendung von Ersatzmodellen für generische geomechanisch-numerische Modelle. Die Revision der Publikation wurde abgeschlossen und das Paper ist in dem internationalen open access peer-reviewed Journal der EGU *Solid Earth* publiziert (Degen et al., 2025). Mit der Publikation wird an einem generischen Modell gezeigt, dass die Rechengeschwindigkeit der Ersatzmodelle um 5-6 Größenordnungen schneller ist als das Originalmodell bei nahezu gleicher (> 99%) Präzision der Modellergebnisse.

Ebenfalls wurden die grundlegenden Programmierarbeiten abgeschlossen, die es erlauben den Beitrag der Modellkalibrierungsdaten (Daten zu den Magnituden der kleinsten und größten Horizontalspannung) zu den Ungewissheiten der Modellprognose statistisch zu quantifizieren. Das daraus entstandene Python-Tool **DOUGLAS** (**D**etection of **O**utliers in **G**eomechanics using **L**inear-elastic **A**ssumption and **S**tatistics) wurde finalisiert und publiziert (Laruelle und Ziegler, 2025a, b). Die Anwendung des Tools DOUGLAS auf das geomechanisch-numerische Standortmodell Zürich Nordost in der Nordschweiz hat gezeigt, dass 16 der vorliegenden 45 Spannungsmagnitudendaten für eine Modellkalibrierung ausreichen, um die gleiche Genauigkeit der Modellvorhersage zu erzielen. Ebenfalls ist das Tool in der Lage Kalibrierungsdatenpunkte objektiv zu identifizieren, die entweder fehlerhafte sind, oder einen Datenpunkt liefern, der nicht im Modellvolumen repräsentiert ist. Eine Publikation wurde Mitte Juni 2025 bei dem peer-reviewed Journal der AGU *Journal of Geophysical Research* eingereicht.

Weiterhin wurden die Arbeiten zu einer Studie abgeschlossen, die den Einfluss von Verschiebungen entlang von tektonischen Störungen, die in geomechanisch-numerische Modelle implementiert sind, quantifiziert. Die Ergebnisse zeigen, dass für den realen Fall des geomechanisch-numerischen Standortmodells Zürich Nordost in der Nordschweiz die Wirkung der Störungen vernachlässigt werden, da die Änderungen eine Größenordnung kleiner sind, als die Variabilität durch Modellungsgewissheiten.

4. Geplante Weiterarbeiten

Fokus der Arbeiten im zweiten Halbjahr 2025 sind:

- Publikation der Ergebnisse der Studie zum Impact von Störungen im Modell auf das Modellergebnisse im internationalen peer-reviewed Journal der EGU *Solid Earth*
- Vorbereitung einer Publikation mit Fokus auf der Darstellung wieviel und insbesondere an welchen Orten Kalibrierungsdatenpunkte ausreichend sind
- Durchführung des fünften SQUARE Workshops im Herbst 2025 an der RWTH Aachen

5. Berichte, Veröffentlichungen

- Degen, D., Ziegler, M., Heidbach, O., Henk, A., Reiter, K., and Wellmann, F. (2025). About the trustworthiness of physics-based machine learning – considerations for geomechanical applications, *Solid Earth*, 16, 477-502, <https://doi.org/10.5194/se-16-477-2025>
- Laruelle, L. and Ziegler, M. (2025). Manual of the Python Script DOuGLAS v1.0, GFZ Helmholtz Centre for Geosciences, Potsdam, WSM TR 25-03, 33 pages, <https://doi.org/10.48440/wsm.2025.003>
- Laruelle, L., Ziegler, M.O. (2025). Python Script DOuGLAS v1.0. GFZ Data Services. <https://doi.org/10.5880/wsm.2025.003>

Antragssteller(in) / ausführende Stelle: RWTH Aachen University		Förderkennzeichen: 02 E 12062C
Vorhaben (Thema/Titel): Spannungsprognosen – Quantifizierung und Reduzierung von Ungewissheiten mit geomechanischnumerischen Untergrundmodellen (SQuaRe) – Teilprojekt C		
Themenbereich des Fördervorhabens: C1.1 Geowissenschaftliche und geotechnische Methoden zur Standorterkundung (Feld und Labor)		
Laufzeit des Vorhabens: 01.12.2022 bis 30.11.2025		Berichtszeitraum: 01.01.2025 bis 30.06.2025
Gesamtkosten des Vorhabens: 244.990,24 EUR		Projektleitung: 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

Ein wesentlicher Fortschritt konnte mit der Fertigstellung und Veröffentlichung des Manuskripts „*About the Trustworthiness of Physics-Based Machine Learning – Considerations for Geomechanical Applications*“ erzielt werden, das nach Überarbeitungen im März 2025 schließlich am 23. Juni 2025 in *Solid Earth* veröffentlicht wurde. In dieser Arbeit wird die Effizienz (bis zu sechs Größenordnungen schnellere Berechnungen) und Genauigkeit ($< 0,01\%$ globale Fehler) eines NI-RB-Surrogatmodells nachgewiesen und damit ein solides Fundament für den Einsatz solcher Modelle im Bereich geomechanischer Spannungsprognosen gelegt. Parallel dazu konnte das generische Referenzmodell erfolgreich auf die Fallstudie in der Nordschweiz (Nördlich Lägern) übertragen werden. Dabei wurde demonstriert, dass die entwickelten Surrogat-Modelle nicht nur schnelle, sondern auch präzise Sensitivitätsanalysen ermöglichen – ein zentraler Schritt zur robusten und probabilistisch fundierten Stressprognose im Kontext geologischer Endlagerstandorte.

Darüber hinaus wurden die Arbeiten zur globalen Sensitivitätsanalyse vertieft und im Rahmen der EGU General Assembly 2025 präsentiert. Der Posterbeitrag „*Global Sensitivity Analysis to Improve Geomechanical Stress Characterizations Using Physics-Based Machine Learning Models*“ wurde in der Session TS8.1 vorgestellt und unterstrich die Leistungsfähigkeit der entwickelten Methoden für die Unsicherheitsquantifizierung und Standortbewertung. Damit konnte die Sichtbarkeit des Projektes in der internationalen Fachcommunity erhöht und die Anschlussfähigkeit der Methoden an aktuelle Forschungsfragen verdeutlicht werden.

4. Geplante Weiterarbeiten

In der nächsten Projektphase liegt der Fokus darauf, die bisherigen methodischen Entwicklungen konsequent in Richtung einer belastbaren Unsicherheitsquantifizierung auszubauen. Ein zentrales Element ist dabei die systematische Inversion von Randbedingungen und Materialparametern anhand der verfügbaren Bohrlochmessungen. Auf diese Weise sollen Unsicherheitsbereiche der Gesteinseigenschaften und der äußeren Belastungsrandbedingungen nicht nur erfasst, sondern auch probabilistisch in die Modelle integriert werden.

Parallel hierzu wird die bestehende Bibliothek an Ersatzmodellen erweitert. Neben Surrogatmodellen, die das gesamte dreidimensionale Simulationsfeld abbilden, sollen gezielt Modelle für punktuelle Spannungsvorhersagen an den Bohrlochstandorten entwickelt werden. Grundlage bildet hierbei die etablierte NI-RB-Methode, die durch moderne Verfahren des maschinellen Lernens zur Strukturreduktion ergänzt wird, um die Effizienz und Genauigkeit weiter zu steigern.

Darüber hinaus werden die Auswirkungen geometrischer Parameter auf die resultierenden Spannungsfelder systematisch untersucht. Im Vordergrund stehen hierbei insbesondere Szenarien mit geologischen Störungen, da diese häufig maßgebliche Kontrollgrößen für die Spannungsverteilung darstellen. Die Ergebnisse dieser Analysen sollen zur Entwicklung robusterer und effizienterer Modellierungsstrategien beitragen.

5. Berichte, Veröffentlichungen

- **Veröffentlicht:** „About the Trustworthiness of Physics-Based Machine Learning – Considerations for Geomechanical Applications“, *Solid Earth*, Bd. 16, pp. 477–502; veröffentlicht am 23. Juni 2025.
- **Eingereicht & Preprint verfügbar:** „Global sensitivity analysis to improve geomechanical stress characterizations using physics-based machine learning models“, als Preprint auf *EarthArXiv* verfügbar ([doi:10.31223/X5D33K](https://doi.org/10.31223/X5D33K)) und aktuell mit „minor revisions“ bei *Mathematics and Geosciences* in Begutachtung.
- **Präsentiert:** Posterbeitrag „Global Sensitivity Analysis to Improve Geomechanical Stress Characterizations Using Physics-Based Machine Learning Models“, EGU General Assembly 2025, Session TS8.1.

Antragssteller(in) / ausführende Stelle: Technische Universität Bergakademie Freiberg, Akademiestr. 6, 09599 Freiberg	Förderkennzeichen: 02 E 12072A
Vorhaben (Thema/Titel): MgO-Beton C3 als langzeitbeständiges und schnellwirksames Verschlusselement für Schachtverschlüsse zukünftiger HAW-Endlager im Salinar (MgO-C3), Teilprojekt A	
Themenbereich des Fördervorhabens: C2.3 Geotechnische und technische Barrieren	
Laufzeit des Vorhabens: 01.12.2022 bis 30.11.2025	Berichtszeitraum: 01.01.2025 bis 30.06.2025
Gesamtkosten des Vorhabens: 694.407,00 EUR	Projektleitung: Dr. Daniela Freyer

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Im Rahmen des Sicherheitsnachweises zur Integrität eines HAW-Endlagers wird für die rechentechnische 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 Permeabilitätsverringerung, bewirkt durch Schachtverschlusselemente, wie mit dem Einbau einer entsprechenden MgO-Baustoffrezeptur (effektive Abdichtung der ALZ über die schnelle und langanhaltende Expansionsdruckentwicklung des Baustoffs), wird bei der Nachweisführung bisher kein Kredit genommen. Dass dieses Potential mit der MgO-Betonrezeptur C3 (3-1-8-Rezepturtyp) besteht, zeigen die Ergebnisse des abgeschlossenen FuE-Projektes ELSA II anhand von zwei in-situ-Großbohrlochversuchen. Zum bisher erreichten Kenntnisstand sind offene Fragestellungen und damit Vorhabensziele die

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

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

AP1: Weiterer Verlauf der Kontaktdruckentwicklung

AP2: Untersuchung der Schwankungsbreite der C3-Rezeptur

AP3: Neuformulierung der Rezeptur

AP4: Berichtserstellung

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

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1: 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. 2300 Tage) haben die radialen Kontaktdrücke ein konstantes Niveau erreicht (4,0 – 4,5 MPa).

Drucktests bzw. Dichtheitstests an der Messeinrichtung zur Lösungsdruckbeaufschlagung sind erfolgt. Eine Leckage am Lösungsreservoir wurde behoben. Mit Beginn der ersten Druckbelastung (1 bar) trat am Packer in der Zugangsbohrung ein plötzlicher Druckverlust auf. Der Defekt (kleine Risse im Schlauchpacker) hat sich nach Erneuerung des Packers jedoch wiederholt, weshalb immer noch nicht mit der Lösungsdruckbeaufschlagung begonnen werden konnte.

AP2: Das neu-gestartete Labor-Monitoringprogramm (Druck, Phasenbestand, Temperatur) für die vier Rezepturvarianten (RV1 bis RV4 mit steigendem Kiesanteil) wurde weitergeführt. Die Phasenbestandsentwicklung wurde an kiesfreien Proben entspr. RV3, welche ebenso die TZF durchlaufen sind, quantifiziert. Es hat sich primär die 5-1-8-Phase gebildet, welche unter Verbrauch von Restporenlösung in die 3-1-8-Phase umkristallisiert. Diese Phasenumwandlung wird erwartungsgemäß mit einem sekundären Druckanstieg der in den Messzellen eingespannten Probekörper verzeichnet. Die Druckentwicklung (mit Abstufung von RV1 bis RV4) ist nach über einem Jahr noch leicht ansteigend aufgrund der noch geringfügig anhaltenden Kristallisation der 3-1-8-Phase.

Als Ursache der von RV1 zu RV4 geringer ausfallenden Druckentwicklung wurde der festgestellte systematisch höhere Luftporenanteil mit zunehmenden Kieszuschlagsanteil identifiziert. In einem geringeren Porenraum geht weniger Kristallisationsdruck verloren als in einem größeren Porenraum. Dies stellt ein bedeutendes Ergebnis für eine ggf. spätere großtechnische Anwendung dar.

AP3: Das Labor-Monitoringprogramm für die Quarzmehl-substituierte RV3-Rezeptur (mit Anhydritmehl) wurde fortgeführt. Die Druck- und Bindemittelphasenbestandsentwicklungen verlaufen entsprechend RV3 in AP2.

4. Geplante Weiterarbeiten

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

Für den Neustart der Lösungsdruckbeaufschlagung im 3. Quartal 2025 wird nun anstelle des Packersystems eine Hydrofrac-Sonde (Doppelpackersystem) eingesetzt, welche in ihrer Größe noch zu modifizieren ist (keine kraftschlüssige Anbindung der zuerst eingebauten Größe).

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.

Antragssteller(in) / ausführende Stelle: Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e.V., Bautzner Landstr. 400, 01328 Dresden		Förderkennzeichen: 02 E 12072B
Vorhaben (Thema/Titel): MgO-Beton C3 als langzeitbeständiges und schnellwirksames Verschlusselement für Schachtverschlüsse zukünftiger HAW-Endlager im Salinar (MgO-C3), Teilprojekt B		
Themenbereich des Fördervorhabens: C2.3 Geotechnische und technische Barrieren		
Laufzeit des Vorhabens: 01.12.2022 bis 30.11.2025		Berichtszeitraum: 01.01.2025 bis 30.06.2025
Gesamtkosten des Vorhabens: 36.856,00 EUR		Projektleitung: 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 Verständnis-entwicklung 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 ELSAll-Laborprobe.

3.3

Quantitative 3D-Bildanalyse. Zusammenfassende Darstellung der Größenverteilungen der Luftporen und den vorhandenen Aufnahmen. Die Größenverteilung der Luftporen (Durchmesser zwischen 0.2 mm und 2.0 mm) variiert systematisch mit der Rezeptur. Die räumliche Verteilung der Körnung ist dagegen unauffällig in Hinblick auf die Rezepturvariationen.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP2.5 Aufnahmen an den demnächst verfügbaren neuen Laborproben.

5. Berichte, Veröffentlichungen

keine

Antragssteller(in) / ausführende Stelle: TU Clausthal – Lehrstuhl für Geomechanik und multiphysikalische Systeme		Förderkennzeichen: 02 E 12082
Vorhaben (Thema/Titel): Langzeitsicheres Abdichtungselement aus Salzschnittblöcken - Durchführung, Auswertung und Reanalyse von THM-Versuchen unter triaxialer Extensionsbeanspruchung (SSBVIER)		
Themenbereich des Fördervorhabens: C2.3 Geotechnische und technische Barrieren		
Laufzeit des Vorhabens: 01.01.2023 bis 30.06.2025		Berichtszeitraum: 01.01.2025 bis 30.06.2025
Gesamtkosten des Vorhabens: 243.874,00 EUR		Projektleitung: 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 bereits vor Beginn des Berichtszeitraums abgeschlossen worden.
- AP 3: Der Salzbetonhohlzylinder ist vom Hersteller bereits vor Beginn des Berichtszeitraums 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 bereits vor Beginn des Berichtszeitraums 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 im Berichtszeitraum abgeschlossen worden. Bei der Durchführung des vierten Prüfkörpertests sind leider bisher einige technische Probleme aufgetreten, daher wird die Durchführung des vierten Prüfkörpertests über den Berichtszeitraum hinaus noch einige Monate fortgesetzt.
- AP 5: - Die numerische Reanalyse des dritten Prüfkörpertests mit Konfiguration der Salzschnittblock-Konstruktion mit einer Fugenbreite von 5 mm und Salzgrusfugenfüllung ist im Berichtszeitraum abgeschlossen worden.
 - Mit der numerischen Reanalyse des vierten Prüfkörpertests konnte aufgrund der aufgetretenen technischen Probleme bei der Versuchsdurchführung des vierten Prüfkörpertests bisher nicht begonnen werden.
- AP 6: Die Erstellung des Schlussberichts ist im Berichtszeitraum fortgesetzt worden und wird nach Abschluss des vierten Prüfkörpertests und – bei abschließend erfolgreicher Versuchsdurchführung – der zugehörigen numerischen Reanalyse nach dem Berichtszeitraum abgeschlossen.

4. Geplante Weiterarbeiten (bis zur Fertigstellung des Schlussberichts)

- AP 1: -
 AP 2: -
 AP 3: -
 AP 4: Abschluss des vierten Prüfkörpertests
 AP 5: Numerische Reanalyse des vierten Prüfkörpertests
 AP 6: Fertigstellung 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.

Antragssteller(in) / ausführende Stelle: TU Braunschweig, Postfach 3329, 38023 Braunschweig		Förderkennzeichen: 02 E 12102
Vorhaben (Thema/Titel): Entwicklung einer selbstlernenden Modellierungsmethodik zu geomechanischen und geotechnischen Prozessen am Beispiel der Planungs- und Auffahrungsphase einer Einlagerungsstrecke eines Tiefenlagers (SEMOTI)		
Themenbereich des Fördervorhabens: C3.3 – Werkzeuge der Sicherheitsanalyse		
Laufzeit des Vorhabens: 01.05.2023 bis 30.04.2026		Berichtszeitraum: 01.01.2025 bis 30.06.2025
Gesamtkosten des Vorhabens: 999.050,00 EUR		Projektleitung: 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 (IAM, InAD)

AP5: Implementierung eines Optimierungsprozesses für die Planungsphase (InAD)

AP6: Implementierung eines Kalibrierungsprozesses für die Auffahrungsphase (IAM)

AP7: Sensitivitätsbetrachtung (IGG, IAM, InAD)

AP8: Administrative Arbeiten

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Der Workflow und die Ergebnisse des Kalibrierungsprozesses für einen Messquerschnitt aus dem Salzstock Gorleben anhand von Konvergenzmessungen wurden nun in einem Artikel im Journal Data-Centric Engineering veröffentlicht. In einem weiteren Artikel wurden aktuelle Ergebnisse eines Kalibrierungsprozesses für einen Messquerschnitt aus dem Salzstock Morsleben anhand von Konvergenz- und Permeabilitätsmessungen für die Konferenz *SaltMech XI* (Juli 2025) finalisiert und veröffentlicht. (AP 2, 3, 4, 6 & 7)

Nach der Anwendung eines 1D-Falls der Adaptiven Sampling Methode im Rahmen des Kalibrierungsprozesses wurde ein mehrdimensionales und zeiteffizientes Beispiel entwickelt. (AP 6)

Ebenfalls steht nun ein zeitabhängiges GPs-basiertes Ersatzmodell zur Verfügung, welches die Zeit als weiteren Input betrachtet und eine Prognose einschließlich Unsicherheitsquantifizierung ermöglicht. Diese Methodik wurde erfolgreich auf den Messquerschnitt aus Morsleben angewandt, benötigt jedoch noch eine Optimierung. (AP 4)

Aus dem Projekt WEIMOS (2022) hat sich ergeben, dass das hier verwendete Stoffmodell *TUBSSalt* im Vergleich zu den Projektpartnern für virtuelle Demonstratoren deutlich geringere Schädigungswerte berechnet. Da eine korrekte Berechnung der Schädigung essentiell für die Ableitung der Permeabilität ist und ebenfalls ein Einfluss auf die Konvergenzen erwartet wird, wurde dieser Aspekt untersucht und hat nun zu einer leichten Anpassung des Stoffmodells geführt. (AP 2)

Es wurden ein erster Optimierungsprozess entwickelt, der 3 Modellparameter mittels GP-basiertem Ersatzmodell hinsichtlich der minimalen Permeabilität der Auflockerungszone optimiert. Es wird derzeit an einer adaptiven Optimierung mittels *Expected Improvement* Kriterium gearbeitet. (AP 5)

Nach ersten erfolgreichen Simulationen mit FLAC3D auf dem TU-internen Hochleistungsrechner Phoenix, konnte nun erfolgreiche eine *Shared Object* Datei (.so) des Stoffmodells *TUBSSalt* erstellt werden, die zur Einbindung in die Linux-Umgebung des Hochleistungsrechners benötigt wird. Es treten jedoch weiterhin Kompatibilitätsprobleme mit dem Stoffmodell auf. (AP 5 & 6)

4. Geplante Weiterarbeiten

Das neue Beispiel der Adaptiven Sampling Methode soll nun innerhalb des Kalibrierungsprozesses in FLAC3D getestet werden. Dabei muss untersucht werden, ob eine globale Sensitivitätsanalyse weiterhin anwendbar bleibt. (AP 6 & 7)

Das zeitabhängige GP-basierte Ersatzmodell muss hinsichtlich der Abbildung der Verteilung der Outputs optimiert werden. Dabei spielen die Wahl der geeigneten Kovarianzfunktion sowie die Verteilung und Anzahl der Trainingspunkte eine entscheidende Rolle. (AP 4)

Mit der angepassten Version des Stoffmodells *TUBSSalt* soll der Kalibrierungsprozess des Messquerschnittes aus Morsleben neu durchgeführt werden. Es wird erwartet, dass die erhöhte Schädigung nicht nur Einfluss auf die Permeabilität, sondern auch auf die Konvergenzen hat, welches dann in der Sensitivitätsanalyse sichtbar sein sollte. (AP 6 & 7)

Im Zuge der adaptiven Optimierung des Modellquerschnittes anhand der Permeabilität soll ein iteratives *Mesh Updating* über eine Python Schnittstelle zu Rhino/Grasshopper implementiert werden, sodass FLAC3D in jedem Iterationsschritt eine aktualisierte Geometrie & Vernetzung zur Verfügung stehen hat. (AP 3 & 5)

Die bestehenden Kompatibilitätsprobleme mit dem Stoffmodell *TUBSSalt* in der Linux-Umgebung des Hochleistungsrechners werden weiter untersucht. (AP 5 & 6)

5. Berichte, Veröffentlichungen

Paul, L.; Urrea-Quintero, J.-H.; Fiaz, U.; Hussein, A.; Yaghi, H.; Stahlmann, J.; Römer, U. & Wessels, H. (2025). *Gaussian Processes enabled model calibration in the context of deep geological disposal*. Data-Centric Engineering, 6, e26. <https://doi.org/10.1017/dce.2025.17>.

Paul, L.; Urrea-Quintero, J.-H.; Fiaz, U. & Stahlmann, J. (2025). *Machine-learning enabled model calibration in the context of digital twinning of an emplacement drift in rock salt*. In: Sobolik, S., Ingraham, M., Matteo, E., Mills, M., Ross, T., Conley, D., & Stormont, J. (Eds.). (2025). *The Mechanical Behavior of Salt XI* (1st ed.). CRC Press. <https://doi.org/10.1201/9781003637349>. S. 268-278.

Antragssteller(in) / ausführende Stelle: Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e.V., Bautzner Landstrasse 400, 01328 Dresden		Förderkennzeichen: 02 E 12112A
Vorhaben (Thema/Titel): Verbundprojekt: Systematic sensitivity analysis for mechanistic geochemical models using field data from crystalline rock (SANGUR), Teilprojekt A		
Themenbereich des Fördervorhabens: 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 30.06.2026		Berichtszeitraum: 01.01.2025 bis 30.06.2025
Gesamtkosten des Vorhabens: 975.750,00 EUR		Projektleitung: 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 UnterAntragssteller(in) / ausführende Stelle: 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 Sensitivitätsanalyse: Dichte-unabhängige Sensitivitätsmaße; Verhalten unter Abhängigkeiten in den Eingangsdaten; Wechselwirkungen.
- AP2: Weiterentwicklung des Workflows zur Berechnung von smart K_d -Werten:
Anwendung der entwickelten Simulationsmethoden (Truncated Plurigaussian Simulation & Markow-Ketten) auf die Dünnschliffe der Lausitz Proben. Ermittlung der mineralogischen Zusammensetzung an Wegsamkeiten und deren Streuung als Maß für Heterogenitäten.
Berechnung von K_d -Werten auf Grundlage der Lausitz Proben. Weiterentwicklung von Python Code zur Automatisierung von K_d -Wert Berechnungen, Dokumentierung des Codes, bessere Pflegebarkeit durch Klassen.
- AP3: Durchführung von Batch-Sorptionsexperimenten mit Sr(II) und Ba(II) auf Gibbsit, Quarz und Orthoklas zur Erweiterung der Datenbasis für geochemische Modellierungen. Re-Fit von Sorptionsdaten an Biotit.
- AP5: Anwendung der SA/UA-Toolbox für Realsysteme (Ergebnisse aus AP2, Lausitzer Granit)
- AP7: Monatlich: Online-Meetings von HZDR, TUC und ÚJV (partiell auch mit SÚRAO); 02.-03.04.2025: Projekttreffen am HZDR

4. Geplante Weiterarbeiten

- AP2: Anwendung der Simulationsmethoden auf weitere Lausitzproben.
Weiterentwicklung des Python Codes zur Automatisierung der K_d -Wert Berechnungen, insbesondere Dokumentation.
Verifikation der Simulationsergebnisse anhand der Sorptions-Experimente von ÚJV.
- AP5: Identifizierung der sensitivsten Parameter für die Uran-Rückhaltung am Lausitzer Granit
- AP7: Weiterführung der monatlichen Online-Meetings zwischen HZDR, TUC und ÚJV Projekttreffen an der TU Clausthal

5. Berichte, Veröffentlichungen

- A. Duckstein, S. Pospiech, R. Tolosana-Delgado, V. Brendler (2025): *Quantification of heterogeneities in the host rock: simulation of granite lithology*, ANNUAL REPORT 2024, Institute of Resource Ecology
- E. Plischke, M. Abdelhafiz (2025): *Global sensitivity analysis for hydrogeochemical models: challenges for compositional data*, ANNUAL REPORT 2024, Institute of Resource Ecology
- A. Duckstein, S. Pospiech, V. Brendler, E. Plischke, M. Abdelhafiz, R. Tolosana-Delgado (2025): *Sensitivity analysis for nuclear waste repository safety assessment considering heterogeneities of the host rock*, 11th International Conference on Sensitivity Analysis of Model Output, April 23.-25., Grenoble, France
- M. Abdelhafiz, E. Plischke, K.-J. Röhligh (2025): *Checkerboard Partitioning for Third-Order Sensitivity Analysis: Application in Reactive Transport Modeling for Nuclear Waste Disposal*, 11th International Conference on Sensitivity Analysis of Model Output, April 23.-25., Grenoble, France
- L. Chiani, E. Borgonovo, E. Plischke, M. Tavoni (2025): *Global sensitivity analysis of integrated assessment models with multivariate outputs*. Risk Analysis: Early View
- L. P. Swiler, D.-A. Becker, D. Brooks, L. Koskinen, P. Kupiainen, E. Plischke, K.-J. Röhligh, J. Samper, S. M. Spiessl (2025): *Sensitivity Analysis Comparisons on Geologic Case Studies: An International Collaboration, Volume 2*. SANDIA Report SAND2025-00230

Antragssteller(in) / ausführende Stelle: Technische Universität Clausthal, Adolph-Roemer-Str. 2a, 38678 Clausthal-Zellerfeld Institute of Geotechnology and Mineral Resources,		Förderkennzeichen: 02 E 12112B
Vorhaben (Thema/Titel): Verbundprojekt: Systematic sensitivity analysis for mechanistic geochemical models using field data from crystalline rock (SANGUR), Teilprojekt B		
Themenbereich des Fördervorhabens: C3.1 Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-) Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung, FuE-Feld C3.3 Werkzeuge der Sicherheitsanalysen		
Laufzeit des Vorhabens: 01.02.2023 bis 31.01.2026		Berichtszeitraum: 01.01.2025 bis 30.06.2025
Gesamtkosten des Vorhabens: 249.921,00 EUR		Projektleitung: 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 UnterAntragssteller(in) / ausführende Stelle: 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: Weiterentwicklung der Toolbox:

- Die Dokumentation des Codes erfolgt fortlaufend und wird über eine automatisch generierte Webseite bereitgestellt: <https://sa-toolbox-mostafa-abdelhafiz-ed056ad0926e4b46ddf8fb8e01fad2490.pages.gwdg.de/> .
- CI/CD-Pipeline für die automatische Webseitendeployment ist aktiv.
- Die Toolbox enthält nun neue Sampling-Optionen, einschließlich des sequentiellen Stick-Breaking-Verfahrens.
- Zur Einholung breiter externer Nutzertests und Expertenfeedbacks wurde die Toolbox zusammen mit einem Artikel beim *Journal of Open Source Software* zur formellen Begutachtung eingereicht.

AP5: Zusätzlich wurde eine neue Methode – Checkerboard-Partitionierung – zur Sensitivitätsanalyse implementiert, die auch Interaktionen dritter Ordnung analysieren kann.

AP7: Monatlich: Online-Meetings von HZDR und TUC. Projekttreffen am HZDR (02.-03.04.2025)

4. Geplante Weiterarbeiten

AP1: Ein spezieller Abschnitt auf der Projektwebseite wurde eingerichtet, um die theoretischen Hintergründe und SOTA-Methoden systematisch darzustellen: Theory Manual – https://sa-toolbox-mostafa-abdelhafiz-ed056ad0926e4b46ddf8fb8e01fad2490.pages.gwdg.de/Theory_guid/

AP4: Die Toolbox wird zusätzlich auf unterschiedlichen Betriebssystemen (Linux und macOS) getestet, um Kompatibilität und Stabilität sicherzustellen.

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

- M. Abdelhafiz, E. Plischke, K.-J. Röhlig (2025): *Checkerboard Partitioning for Third-Order Sensitivity Analysis: Application in Reactive Transport Modeling for Nuclear Waste Disposal*, 11th International Conference on Sensitivity Analysis of Model Output, April 23.-25., Grenoble, France
- A. Duckstein, S. Pospiech, V. Brendler, E. Plischke, M. Abdelhafiz, R. Tolosana-Delgado (2025): *Sensitivity analysis for nuclear waste repository safety assessment considering heterogeneities of the host rock*, 11th International Conference on Sensitivity Analysis of Model Output, April 23.-25., Grenoble, France

Antragssteller(in) / ausführende Stelle: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 12122A
Vorhaben (Thema/Titel): Stabilität von Mineralphasen des Eisens im Nahfeld eines Endlagers (STAMINA)		
Themenbereich des Fördervorhabens: C3.1: Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-) Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung		
Laufzeit des Vorhabens: 01.11.2022 bis 31.03.2026	Berichtszeitraum: 01.01.2025 bis 30.06.2025	
Gesamtkosten des Vorhabens: 571.790,00 EUR	Projektleitung: Dr. Sven Hagemann	

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Das Vorhaben verfolgt das Ziel, ein chemisches und thermodynamischen 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: Bezüglich der Isopiestik konnten von der Planungsserie für Wasseraktivitäts-Linien bei sehr hohen Salzkonzentrationen für die Systeme Fe(II)-Na,K,Mg,Ca-Cl-H₂O(l) bei 40°, 60° und 80°C bereits die Hälfte der Experimente abgeschlossen werden. Vier isopiistische Töpfe äquilibrieren zum Ende dieses Berichtszeitraums bei unterschiedlichen Temperaturen, sieben isopiistische Versuche stehen noch aus.

Bezüglich der UV/VIS-Messungen zur Aufklärung der Chlorokomplexbildung von Fe(II) in salinaren Lösungen wurde zunächst eine Kalbration der unterschiedlichen Küvetten (0,1 mm Durchflussküvette und 0,01 mm Schichtküvetten) zur Ermittlung der tatsächlichen Weglänge/Schichtdicke erfolgreich durchgeführt. Anschließend wurde das System Fe(II)-Na-Cl-H₂O von 190-400 nm mit den jeweils adäquaten Küvetten bei 10°C, 25°C und 50°C vermessen und ausgewertet.

Um die eingesetzten FeCl₂-Stammlösung besser zu charakterisieren, wurde eine gravimetrische Bestimmungsmethode erarbeitet, die nun einsatzbereit ist.

AP2: Es wurden ergänzende Löslichkeitsversuche mit Fe(OH)₂ in NaOH-Lösungen durchgeführt. Die Anwesenheit von gut kristallisiertem NaOH in den Gleichgewichtssystemen wurde durch XRD bestätigt. Die Ergebnisse lassen sich bis hin zu hohen OH-Konzentrationen durch Annahme eines Fe(OH)₃⁻ - Komplexes interpretieren. Ein Komplex Fe(OH)₄²⁻ tritt nicht auf.

AP3: Die Ergebnisse aus den Löslichkeitsversuchen mit Fe(OH)₂ bildeten die Grundlage zur Ableitung der Stabilitätskonstante sowie Ionenwechselwirkungskoeffizienten für Fe(OH)₃⁻.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP1: Im nächsten Berichtszeitraum werden die noch fehlenden Wasseraktivität-Linien für die Systeme Fe(II)-Na,K,Mg,Ca-Cl-H₂O(l) bei sehr hohen Salzkonzentrationen bei 40, 60 und 80°C erstellt.

Die verwendeten FeCl₂-Stammlösungen werden mit der erarbeiteten gravimetrischen Bestimmungsmethode analysiert.

Die UV/VIS-Messungen zur Aufklärung der Chlorokomplexbildung von Fe(II) wird mit den Systemen Fe(II)-K,Mg-Cl-H₂O fortgesetzt.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine

Antragssteller(in) / ausführende Stelle: Karlsruher Institut für Technologie (Großforschungsaufgabe) Institut für Nukleare Entsorgung (INE)		Förderkennzeichen: 02 E 12122B
Vorhaben (Thema/Titel): Verbundprojekt: Stabilität von Mineralphasen des Eisens im Nahfeld eines Endlagers (STAMINA), Teilprojekt B		
Themenbereich des Fördervorhabens: 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: 01.01.2025 bis 30.06.2025
Gesamtkosten des Vorhabens: 239.471,61 EUR		Projektleitung: 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, CORSO, 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) Fortführung 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) Fortführung der Auswertung von EXAFS Untersuchungen im $\text{Fe}^{2+}\text{-Ca}^{2+}/\text{K}^+\text{-Cl}^-$ System (für GRS); (iii) Fortführung von Experimenten im Fe(II)-CO_3 System.

AP 2: (i) Fortführung und Erweiterung 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)-Silikat Festphasen.

AP 3: (i) Entwicklung eines thermodynamischen 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) Mitautorenreview 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: Mitautorenreview 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) Bewertung 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) Finalisierung der Auswertung von EXAFS Untersuchungen im $\text{Fe}^{2+}\text{-Ca}^{2+}/\text{K}^+\text{-Cl}^-$ System (mit GRS); (iii) Fortführung von Experimenten im Fe(II)-CO_3 System.

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

AP 3: (i) Validierung des thermodynamischen 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) Publikation des Manuskripts zur Löslichkeit und Thermodynamik von $\text{Fe(OH)}_2(\text{cr})$ und $\text{Fe}_2(\text{OH})_3\text{Cl}$ (iii) Erstellung eines thermodynamischen Modells im $\text{Fe}^{3+}\text{-Ca}^{2+}\text{-H}^+\text{-OH}^-\text{-Cl}^-$ - $\text{H}_2\text{O(l)}$ System basierend auf den experimentellen Daten der Löslichkeitsexperimente sowie durchgeführten spektroskopischen Untersuchungen (EXAFS).

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

AP 5: (i) Publikation 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. (ii) Erstellung eines Manuskripts zum Einfluss von Calcium auf die Löslichkeit und Speziation von Fe(III) .

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine im Berichtszeitraum.

Antragssteller(in) / ausführende Stelle: BGE TECHNOLOGY GmbH		Förderkennzeichen: 02 E 12133A
Vorhaben (Thema/Titel): Verbundprojekt: Weiterführung der Entwicklung von Ausbau von Grubenbauen für ein HAW-Endlager in Tongestein (AGEnT002)“		
Themenbereich des Fördervorhabens: C2.1 - Sicherheits- und Endlagerkonzepte		
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2023 bis 31.08.2025		Berichtszeitraum: 01.01.2025 bis 30.06.2025
Gesamtkosten des Vorhabens: 386.567,93 EUR		Projektleitung: 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

AP3: Im Rahmen von 3D-Berechnungen wurde mit den Codes Sofistik und ATENA ein Modell des Ausbausystems des Streckenkreuzes mit Modellierung der Bewehrungseinlagen im Beton auf Basis der Ergebnisse der Entwurfsplanung in AP2 aufgebaut. Über einen eigens etablierten Workflow wurden die Eingangsgrößen aus dem geomechanischen Modell (in FLAC3D) an die Codes übergeben. Die Übergabe und anschließende Analyse erfolgte für unterschiedliche Zeitpunkte in der Lebensdauer des Streckenkreuzes. In allen Modellen können Bereiche mit erhöhter Belastung der Ausbauschale identifiziert werden. In der Bewehrungsplanung bzw. Ausbaudimensionierung werden diese Bereiche mit einem höheren Bewehrungsgrad versehen. Die Betongüte und -dicke wird nicht lokal variiert.

AP4: Unterstützend zur Dokumentation und Visualisierung der Projektergebnisse wurde die BIM Methodik (Building Information Modelling) angewendet, die den gesamten Lebenszyklus eines Bauwerks abdecken kann. Rahmen dieses Projekts wird beginnend mit der Konzeptplanung des Grubengebäudes und der einzelnen Komponenten eine entsprechende Struktur aufgebaut. Dabei wird BIM bereits von Beginn an in Form einer definierten Ordnerstruktur integriert. In dieser Struktur werden alle Projektinformationen und Arbeitsstände idealerweise versioniert abgelegt. Eine ordnungsgemäße Versionierung ermöglicht die lückenlose Nachverfolgbarkeit von Änderungen und verhindert, dass die Gründe für Anpassungen verloren gehen, was ansonsten zu wiederholten Entscheidungsprozessen führen könnte. Für den Auffahrungs- und Errichtungsprozess wurde eine Ablaufsimulation in den BIM-Prozess eingegliedert. Erste Arbeitsstände in Form von Skizzen und Zeitschätzungen wurden bereitgestellt. Auf Grundlage dieser Informationen wurde eine Ablaufsimulation entwickelt, die das technische Vorgehen veranschaulicht und potenzielle Probleme im Ablauf visuell aufzeigt. Da sich das BIM-Modell kontinuierlich weiterentwickelt, bildet diese Simulation einen wesentlichen Eckpfeiler auf dem Weg zur Ausführungsplanung.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP4: Finalisierung des Abschlussberichtes bis Projektende

5. Berichte, Veröffentlichungen

keine

Antragssteller(in) / ausführende Stelle: DMT GmbH & Co. KG		Förderkennzeichen: 02 E 12133B
Vorhaben (Thema/Titel): Verbundprojekt: Weiterführung der Entwicklung von Ausbau von Grubenbauen für ein HAW-Endlager in Tongestein (AGEnT002), Teilprojekt B		
Themenbereich des Fördervorhabens: C2.1 Sicherheits- und Endlagerkonzepte		
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2023 bis 31.08.2025		Berichtszeitraum: 01.01.2025 bis 30.06.2025
Gesamtkosten des Vorhabens: 268.842,23 EUR		Projektleitung: 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 4: Dokumentation und Visualisierung

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Die Modellierungen zum Tübbingausbau wurde im Berichtszeitraum fortgesetzt. Dabei wurde für den im vorherigen Berichtszeitraum befahrenen Grubenwasserkanal Ibbenbüren ein Kalibrierungsmodell im 3DEC erstellt und mit verschiedenen Lastansätzen untersucht. Als vielversprechendster Ansatz stellte ich dabei der Fall mit analytisch ermittelten Spannungen als Eingangsparameter für die 3DEC-Modellierung heraus.

Für die untersuchte Zugangsstrecke wurde parallel der Weg mit den gekoppelten Modellen aus FLAC3D und 3DEC noch weiterverfolgt. Es zeigte sich jedoch während der weiteren Bearbeitung, dass trotz umfangreicher Anpassungs- und Optimierungsarbeiten keine zufriedenstellenden Ergebnisse für den Tübbingausbau mit den 3DEC-Modell erzielt werden konnte. Somit erwies sich dieser Weg als nicht zielführend und es wurde auf Basis der Erkenntnisse der Modellierung des Grubenwasserkanals ein analytischer Weg für die initialen Belastungsannahmen des 3DEC-Modells gewählt. Die Berechnungen wurden für verschiedenen Varianten durchgeführt und befinden sich in Auswertung.

Die Arbeiten für AP 3 wurden fortgesetzt. Hierbei hat sich gezeigt, dass im Fall der geringsten Gesteinsparameter und einer Pfeilerbreite von 3-mal Streckenbreite die Pfeilerkerne plastifizieren und beide Layouts nicht standsicher sind. Die Pfeilerbreite wurde daraufhin auf die 4-fache Streckenbreite erhöht, wodurch der Pfeilerkern intakt bleibt. Zusätzlich wurden Kriechberechnungen über die Betriebsdauer des Endlagers durchgeführt. Hierfür wurde ein Kriechansatz analog zu AGEnT I gewählt. Durch das Kriechen werden die Deviatorspannungen in den Pfeilern verringert, wodurch sich ebenfalls die Ausnutzung des Dilatanzkriteriums verringert.

Im Rahmen von AP4 wurde mit der Erstellung des Abschlussberichtes begonnen.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP3: Koppelung der entwickelten gebirgsmechanischen Modelle mit thermische Belastungseinflüssen. Für die Endlagerlayouts aus AP3 werden thermomechanisch gekoppelte Berechnungen durchgeführt, in denen die Wärmeentwicklung der Abfälle über die Betriebsdauer berücksichtigt werden. Anschließend werden die Zustände der Pfeiler anhand des Dilatanzkriteriums bewertet.

AP4: Finalisierung des Abschlussberichtes bis Projektende.

5. Berichte, Veröffentlichungen

keine

Antragssteller(in) / ausführende Stelle: Technische Universität Bergakademie Freiberg, Akademiestr. 6, 09599 Freiberg		Förderkennzeichen: 02 E 12143
Vorhaben (Thema/Titel): Feinerkundung der Steinsalzkontur im Bereich zukünftiger Verschlussbauwerke in HAW-Endlagern durch in situ Raman-Spektroskopie (SaRa)		
Themenbereich des Fördervorhabens: C2.3 Geotechnische und technische Barrieren		
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2023 bis 30.06.2026		Berichtszeitraum: 01.01.2025 bis 30.06.2025
Gesamtkosten des Vorhabens: 517.971,00 EUR		Projektleitung: 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: Die systematischen Messungen der am IfAC vorliegenden und dort bereits vermessenen Salz-Proben(kerne) mit dem am ITUN neu entwickelten Ramanmesssystem wurden weiter fortgesetzt. Neben reinen Salzen wurden gezielt auch Proben von Mineralgemischen messtechnisch untersucht. Zum Vergleich wurden auch Messungen an nicht-ramanaktiven Mineralen (Halit, Sylvin) durchgeführt.

AP2: Alle Ramansystem-Komponenten (Laser, Roboterarm, 3D-Kamera, Spektrometer, etc.) sind fest zu einem einheitlichen, beweglichen System verbaut. Die zugehörige LabView-Steuerung wurde fertiggestellt. Alle LabVIEW sub VI's sind nun in einer einzelnen Haupt-sub VI zusammengefasst. Mit dem so entwickelten Messsystem ist es jetzt möglich eine Mineraloberfläche punktuell anzusteuern und ramantechnisch zu vermessen: Über einen PC werden anhand eines Realfotos gewünschte Messpunkte ausgewählt, anschließend automatisch über den Roboterarm angesteuert und durch die Ramansonde vermessen. Die automatische Spektrenauswertung erfolgt direkt im Anschluss.

AP3: Der entwickelte Spektren-Auswertalgorithmus wurde an verschiedenen Salzmineralen mit unterschiedlichen Messbedingungen getestet. Auch die Tests des Algorithmus im Zusammenspiel mit dem vollständig automatisierten Messsystem (Robotersteuerung) verliefen erfolgreich.

AP4: Anhand der Vermessung von Salzkernprobekörpern im Probenregal wurden Effekte wie Signalrauschen, Einfluss von Umgebungslicht etc. untersucht. Der negative Einfluss von Störlicht auf Spektren niedriger Intensität konnte erfolgreich durch einen Faltenbalg an der Ramansonde minimiert werden.

AP5: Erste quasi-*in situ* Messungen mit dem automatisierten Raman-Messsystem an Salzkernprobekörpern in einem Probenregal wurden erfolgreich durchgeführt und ausgewertet. Der Aufbau und die Abmessungen des Ramanmesssystems wurden für einen mobilen Einsatz optimiert. In einer 0,80 x 0,80 x 0,80 m Box sind sämtliche Systemkomponenten (Laser inklusive Steuerung, Spektrometer etc.) staubgeschützt verbaut. Auf dieser Box ist der 0,90 m hohe Roboterarm mit 3D-Kamera und Ramansonde fixiert.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP2: Arbeiten an elektrischen Komponenten des Gesamt-Messsystems (Not-Aus, Kabel zur Stromversorgung) werden abgeschlossen.

AP 3: Letzte Parameteroptimierungen werden abgeschlossen.

AP 4: Die Analyse und Berücksichtigung von Signalrauschen und Umgebungslicht werden abgeschlossen.

AP 5: Letzte Arbeiten an der vollbeweglichen Mess-Plattform werden abgeschlossen. Eine Erprobung im quasi-*in situ* Maßstab mit erstem mobilem Einsatz ist in der Lagerhalle für große Salz- und Gesteinsprobekörper am IfG Leipzig für Q3 2025 geplant. Erkenntnisse und Erfahrungen dienen der Vorbereitung des untertägigen Testeinsatzes in der Grube Teutschenthal. Dieser ist für Q4 2025 geplant.

AP 6: Es werden die Arbeiten am Abschlussbericht begonnen. Außerdem wird an einer Publikation zum im Projekt entwickelten Algorithmus der automatisierten Mineral-Identifikation gearbeitet.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Antragssteller(in) / ausführende Stelle: Friedrich-Schiller-Universität Jena (FSU)		Förderkennzeichen: 02 E 12153A
Vorhaben (Thema/Titel): Erosion von Bentonit unter In-situ Bedingungen durch Einwirkung natürlicher Wässer in geologischen Tiefenlagern. Kurztitel: EVIDENT		
Themenbereich des Fördervorhabens: 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: 01.01.2025 bis 30.06.2025
Gesamtkosten des Vorhabens: 395.520,00 EUR		Projektleitung: 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 Kollorado-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: Arbeiten des ersten Sets von Erosionsexperimenten wurden abgeschlossen. Dies beinhaltete zwei MX-80-Bentonit-Proben mit Quarzbeimengungen (Korngröße: 50-64 µm) von 20 Prozent in Kontakt mit Grimsel-Grundwasser und einer Zugabe von 2 mM Ca. Im Vergleich zu den experimentellen Ergebnissen des Kollorado-e³ Projektes wurde eine leicht höhere Erosionsrate festgestellt, jedoch ist kein Unterschied in der Erosionsmasse zwischen den Proben unterschiedlicher Korngröße der akzessorischen Gemeingeteile zu beobachten.

Das erste Erosionsexperiment mit einem erbohrten Plug aus einer von SKB zur Verfügung gestellten Probe des LOT-Experimentes in Äspö (Block MX-80-18E) wurde abgeschlossen. Als Kontaktlösung wurde hier reines Grimsel-Grundwasser verwendet. Es konnte in diesen ersten Versuchen eine um eine Größenordnung höhere Erosionsrate als bei dem thermisch unbehandelten MX-80 aus den Kollorado-e³ Versuchen festgestellt werden. Es wurde ein zweites Erosionsexperiment mit den restlichen Plugs der thermisch behandelten LOT und ABM- Proben gestartet. Proben des Ausgangsmaterials aus dem LOT und dem ABM-

Experiment, zum direkten Vergleich mit den thermisch behandelten Proben wurden von SKB zur Verfügung gestellt.

Die Na- Homoionisierung nach Aufmahlung und Größenfraktionierung in Teilchengrößen < 50 nm, 50–200 nm und 200–2000 nm mittels Zentrifugation der thermisch behandelten Bentonit-Proben (LOT/ABM) wurde abgeschlossen. Es fand ein Aufenthalt im Forschungszentrum Jülich statt bei dem ATR-FTIR- und XRD- Messungen dieser homoionisierten Korngrößenfraktionen zur mineralogischen Charakterisierung statt.

An Kernproben der Lamprophyr-Granodiorit Kontaktzone aus der LAC 23.001 Bohrung in Grimsel wurden μ CT Messungen durchgeführt, um die Oberflächengeometrie der Kluft zu gewinnen. Methodische Arbeiten zur Nutzung von maschinellem Lernen (ML) für die Charakterisierung von Porenräumen in heterogenen Gesteinen und zur Quantifizierung der Bentoniterosion inklusive Kluftgeometrien wurden veröffentlicht.

4. Geplante Weiterarbeiten

Ein längerer Aufenthalt am KIT-INE zum Messmethodenvergleich LIBD-NTA ist geplant. Bilaterale Treffen mit KIT-INE zur Koordinierung und Interpretation der Erosions-Experimente sind vorgesehen. Ein längerer Aufenthalt am Forschungszentrum Jülich ist geplant, um XRD-Messungen und Sorptionsexperimente durchzuführen.

AP1: Erosionsexperimente der vom SKB erhaltenen Referenzproben (LOT und ABM), die keinen thermischen Puls erhalten haben, sollen durchgeführt werden. Betrachtung der < 50 nm, 50-200 nm und 200-2000 nm Na-homoionisierte dieser Proben.

Erstellung eines Meshs aus den μ CT-Daten und Konzeption von Erosionszellen mittels 3D-Druck zur Simulation der realen Oberflächenrauigkeit.

Weiter Messungen mit der splCP-MS sollen durchgeführt werden, um eine Methode zur Messung des Effluents der Erosionsexperimente zu entwickeln.

5. Berichte, Veröffentlichungen

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.

Sadeghnejad, S., Hupfer, S., Pingel, J., Lanyon, B., Schneeberger, R., Blechschmidt, I., Alonso, U., Hauser, W., Kraft, S., Geckeis, H., Schäfer, T., 2025. Bentonite mass loss in fractured crystalline rock quantified from CT scans using digital rock physics and machine learning: case study from the Grimsel Test Site (Switzerland). *Appl. Clay Sci.* 276, 107915.

Moslemipour, A., Sadeghnejad, S., Enzmann, F., Khoozan, D., Schäfer, T., Kersten, M., 2025. Efficient multi-scale image reconstruction of heterogeneous rocks with unresolved porosity using octree structures. *Comput. Geosci.* 29, 24.

Moslemipour, A., Sadeghnejad, S., Enzmann, F., Khoozan, D., Hupfer, S., Schäfer, T., Kersten, M., 2025. Multi-Scale Pore Network Fusion and Upscaling of Microporosity Using Artificial Neural Network. *Marine and Petroleum Geology*, 107349.

Antragssteller(in) / ausführende Stelle: Karlsruher Institut für Technologie (Großforschungsaufgabe)		Förderkennzeichen: 02 E 12153B
Vorhaben (Thema/Titel): Erosion von Bentonit unter In-situ Bedingungen durch Einwirkung natürlicher Wässer in geologischen Tiefenlagern. Kurztitel: EVIDENT		
Themenbereich des Fördervorhabens: 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: 01.01.2025 bis 30.06.2025
Gesamtkosten des Vorhabens: 388.297,00 EUR		Projektleitung: Prof. Dr. Geckeis

1. Vorhabenziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

44 Probenstücke ($7 \times 7 \times 5$ mm) aus den GTS-Bohrkernen 17.3 und 17.5 wurden durch Einbetten in Harz, Schleifen, Polieren und Schneiden vorbereitet. An repräsentativen Probenstücken sowohl aus Granodiorit als auch aus Lamprophyr wurde ein Mapping der Elementverteilung mittels SEM-EDX durchgeführt, und die Verteilung natürlicher Radionuklide mittels Autoradiographie gemessen. Die Kombination der Ergebnisse der beiden analytischen Technik zeigte, dass der Großteil der Radioaktivität von ^{40}K in beiden Gesteinstypen stammt. Im Granodiorit wurden kleine Einschlüsse von Uran und Thorium festgestellt, jedoch nicht in Mengen, die ein von ^{40}K unterscheidbares Signal mittels Autoradiographie erzeugen würden. Außerdem wurden pulverisierte Bohrkernproben mittels XRF und BET charakterisiert. Die XRF Analysen zeigten, dass sich die Zusammensetzung des Gesteines aus CFM 23.001 leicht von der aus den 17.3 und 17.7 Bohrkernen unterscheidet, jedoch weiterhin der allgemeinen Klassifikation von Granodiorit und Lamprophyr entspricht. Insbesondere sind die Anteile von MgO ca. 10-mal höher, und von K_2O , Fe_2O_3 sowie MnO ca. 3-mal höher im Lamprophyr als im Granodiorit. Die BET Analyse ergab eine etwas größere spezifische Oberfläche des Lamprophyrs (BET_{La} ca. $2.16 \text{ m}^2/\text{g}$) im Vergleich zum Granodiorit (ca. $1.55 \text{ m}^2/\text{g}$).

Die Post-Mortem Analysen von Proben aus dem LIT Experiment wurden fortgesetzt. Gewählte Proben aus zwei Bentonit-Profilen (Profil 1 und 2) wurden nach Säureaufschluss mittels ICP-OES und semiquantitativer ICP-MS analysiert. Dabei wurden signifikante Einflüsse der Probenmatrix auf die Messwerte festgestellt. Daher wurde ein dreistufiges extraktionschromatographisches Trennverfahren mittels TEVA®, UTEVA® und TRU® eingesetzt, um drei Fraktionen (Np/Pu, U und Am) aus 6 Proben aus dem Profil 1 zu erhalten. Die so gewonnenen Fraktionen wurden mittels quantitativer ICP-MS analysiert und zeigten, dass nur die Konzentration von ^{237}Np bestimmt werden konnte, während die Konzentration von ^{233}U , ^{242}Pu und ^{241}Am unterhalb der Nachweisgrenzen lag. Der Inhalt von 4 Probenampullen, die mit RN Cocktails gefüllt in den Bentonitring zu Beginn des LIT Experiments eingesetzt wurden, wurde mit Königswasser aufgeschlossen und wird nun nach dem gleichen Protokoll für extraktionschromatographische Trennungen und ICP-MS-Analysen vorbereitet.

Die Analyse des *in-situ* Radionuklid-Tracer-Tests CFM Run 22-02 ist abgeschlossen und die Interpretation der endgültigen Ergebnisse für ^{232}Th , ^{233}U und ^{238}U ist derzeit im Gange.

4. Geplante Weiterarbeiten

Sorptionsversuche mit $^{232,233}\text{U}$, $^{238,242}\text{Pu}$, $^{241,243}\text{Am}$, ^{237}Np und ^{99}Tc in Grimsel Grundwasser an charakterisierten Granodiorit- und Lamprophyr-Proben in An/Abwesenheit von Bentonit Kolloiden sind in Vorbereitung. Sie werden sowohl mit Gesteinspulver als auch mit polierten Probenscheiben durchgeführt. Um in den Laborexperimenten geochemische Bedingungen einzustellen, die für die *in-situ* Umgebung im GTS relevant sind, werden ausgewählte organische Reduktionsmittel (Rongalit und Hydrazin) und pH Puffersysteme (Natriumbicarbonat und TRIS) getestet. Diese Tests sind nicht nur für die Sorptionsexperimente relevant, sondern auch für die Vorbereitung der geplanten *in situ* Radionuklid-Tracer-Tests mit redoxsensitiven Radionukliden.

Weiterhin ist die Anwendung der ultra-empfindlichen AMS Methode geplant, um ^{233}U , ^{242}Pu and ^{241}Am Konzentrationen in LIT Bentonitprofilen bestimmen zu können, die unterhalb der Nachweisgrenze der ICP-MS Methode lagen. Gleichzeitig werden größere LIT-Probenvolumina aufgearbeitet, um zu versuchen, mittels chromatographischer Extraktion und ICP-MS den Anteil der Radionuklid-Tracer, die aus den LIT-Ampullen in den Bentonit diffundierten, doch noch bestimmen zu können.

5. Berichte, Veröffentlichungen

F. Quinto. "Radionuclide migration in crystalline host rock: insights from the Grimsel Test Site (CH)". Eigeladener Vortrag am VERA Labor, Fakultät für Physik - Isotopenphysik, Universität Wien (Österreich) am 16 Januar 2025.

Antragssteller(in) / ausführende Stelle: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 12153C
Vorhaben (Thema/Titel): Erosion von Bentonit unter In-situ Bedingungen durch Einwirkung natürlicher Wässer in geo-logischen Tiefenlagern. Kurztitel: EVIDENT		
Themenbereich des Fördervorhabens: 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: 01.01.2025 bis 30.06.2025
Gesamtkosten des Vorhabens: 291.110,00 EUR		Projektleitung: Dr. Holger Seher

1. Vorhabensziele / 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 Kollorado-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

AP1: Keine Arbeiten

AP2:

- Die NAGRA plant für alle Modellierungsarbeiten, die bisher in Grimsel durchgeführt wurden, einen zusammenfassenden Bericht. Dieser wird von Paul Smith erarbeitet. Es erfolgte ein Austausch zwischen Holger Seher und Paul Smith zur Darstellung der aktuellen (Projekt EVIDENT) und vergangenen Arbeiten (Kolorado Projekte) der GRS auf diesem Gebiet.
- Das Konzept zur Durchführung des Benchmarks zum Kationenaustausch wurde finalisiert und der NAGRA übermittelt. Nach möglichen Kooperationspartner wird gesucht.
- Es wurde damit begonnen, den alten Code zur Kolloidstabilität von Holger Seher (DOI: 10.3390/colloids4020016) auf Python umzustellen.
- 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. Parametervariationen zur Diffusion von Tc-99 im LIT und Vergleich mit experimentell ermittelten Werten.
- Durchführung von Modellrechnungen zu Transport und Reduktion von Np-237 und U-233 sowie zum kolloidgetragenen Transport von Am-243 und Pu-242 im Feldexperiment CFM Run-22-02.

AP3: Keine Arbeiten

4. Geplante Weiterarbeiten

AP2:

- Absprachen mit der NAGRA, wann der Benchmark zum Kationenaustausch beginnen kann.
- Austausch mit dem KIT, wie der auf Python umgestellte Code mit den aktuellen Arbeiten am INE zusammengebracht werden kann.
- Durchführung von Modellrechnungen zur Vorhersage des kolloidgetragenen Radionuklidtransport für die neu geplanten CFM-Feldexperimente.
- Weiterführung von Modellrechnungen zur Diffusion im Bentonit.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine

Antragssteller(in) / ausführende Stelle: Karlsruher Institut für Technologie (Universitätsaufgabe) Kompetenzzentrum für Materialfeuchte		Förderkennzeichen: 02 E 12163A
Vorhaben (Thema/Titel): Verbundprojekt: Vertikales hydraulisches Dichtsystem nach dem Sandwich-Prinzip – Hauptprojekt Phase 2 (Sandwich-HP2), Teilprojekt A		
Themenbereich des Fördervorhabens: 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: 01.01.2025 bis 30.06.2025
Gesamtkosten des Vorhabens: 870.108,53 EUR		Projektleitung: 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 wurde die Baseline Study zu den mineralogischen und geotechnischen Grundparametern für Calcigel und Secursol UHP veröffentlicht.

Der MiniSandwichversuch 15 (Calcigel W1 mit Pearson Wasser A3) musste wegen Undichtigkeiten abgebrochen werden und wurde erneut installiert (Test 15n). Parallel wurden die MiniSandwich Versuche Test 17-20 (Calcigel 1W/2W, Wdh. Test 11-14) installiert. Die Wassergehalte der Ausbauproben aus den konventionellen Quelldruckversuchen mit Calcigel (1W) überstiegen die berechneten Sättigungswassergehalte. Die Quelldruckzellen wurden modifiziert, um mögliche Volumenänderungen bei Wiederholungsmessungen aufzuzeichnen. Es wurden Benchmarkquelldruckversuche mit Calcigel (Schacht1, 2W) und deionisiertem Wasser bei KIT, GRS, IfG, IBeWa, RUB und CIEMAT unter standardisierten Bedingungen gestartet.

Der HTV-9 wurde beendet und rückgebaut. Wassergehaltsbestimmungen sowohl bei Raumtemperatur als auch bei 200 °C zeigen, dass DS4 nicht wie aus den in-situ Messungen angenommen vollständig gesättigt ist. Zudem ist in DS1-DS3 ein Wassergehaltsgradient zur Segmentmitte entlang der vertikalen Achse zu beobachten. Die Differenz aus den Feuchten, welche der Gleichgewichtsfeuchte bei Umgebungsbedingungen entspricht, weist bereits auf einen Austausch von $\text{Ca}^{2+}/\text{Mg}^{2+}$ Zwischenschichtkationen gegen Na^+ aus dem Modellporenwasser und daraus resultierende Änderungen im Hydratationsverhalten hin.

Im Rahmen des Promotionsvorhabens zu den ES Materialien wurden Kalksteinmehle hinsichtlich Phasenbestand (Calcit:Dolomit-Gehalt), Korngröße ($< 125 \mu\text{m}$), Kornform und Benetzungsverhalten (Kontaktwinkelmessungen) charakterisiert. Aufgrund von notwendigen Methodenanpassungen dauert die Grundcharakterisierung und Auswertung an.

AP3: Die numerischen Simulationen wurden bzgl. Rückkopplung mit Materialeigenschaften sowie den durchgeführten und zu planenden Laborexperimenten begleitet. siehe Halbjahresberichte von GRS und TUBAF zu 02E12163B bzw. 02E12163C.

AP4: Ein Projektmeeting fand am 25./26.03.25 online statt. Das Sandwich-Projekt wurde mit mehreren Beiträgen beim Waste Management Symposium 2025 (März) in Phoenix durch GRS sowie beim Mont Terri Technical Meeting (Mai) in Porrentruy vorgestellt. Die Zusammenarbeit mit dem Sandwich-Task im DECOVALEX-2027 sowie mit dem WP10 ANCHORS im EURAD-2 und im Rahmen des Sandwich SP1 wurde fortgesetzt.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP1: Weiterführung von Aufsättigung und Monitoring der Verschlussysteme in den beiden Experimentalschächten, möglicherweise in Kombination mit einem Tracer-Versuch

AP2: Mineralogische Charakterisierung HTV-9, Vorbereitung HTV-10, Weiterführung Benchmarkquelldruckversuche mit Calcigel, Start MiniSandwich Versuche Test 15n, Test 17-20, Wiederholung Quelldruckversuche Calcigel (1W)

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

5. Berichte, Veröffentlichungen

Asaad, A. et al. (2025) Mineralogical and geotechnical characterization of two German bentonites from Westerwald and Bavaria. <https://doi.org/10.1016/j.clay.2025.107901>

Emmerich, K. and Hinze, M. (2025) The Sandwich (SW-A) project – In-situ, lab, simulation, Mont Terri Technical Meeting (TM-42); Porrentruy (CH), 13 May

Antragssteller(in) / ausführende Stelle: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 12163B
Vorhaben (Thema/Titel): Verbundprojekt: Vertikales hydraulisches Dichtsystem nach dem Sandwich-Prinzip – Hauptprojekt Phase 2 (Sandwich-HP2), Teilprojekt B		
Themenbereich des Fördervorhabens: 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: 01.01.2025 bis 30.06.2025
Gesamtkosten des Vorhabens: 1.258.340,00 EUR		Projektleitung: 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 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: Die Aufsättigung der Dichtsysteme in beiden Schächten wurde mit nahezu konstanten Injektionsdrücken von ca. 20 bar absolut (Schacht 1) bzw. 12 bar absolut (Schacht 2) wie schon am Ende des vorherigen Berichtszeitraums fortgesetzt. Für Schacht 1 liegt die Injektionsrate derzeit bei knapp 13 ml/h. Die Sensordaten lassen auf eine vollständige Aufsättigung von DS1 und nahezu auch von DS2 schließen. Die radialen Spannungen in DS1 liegen zwischen 2,2 MPa und 2,8 MPa; in DS2 zwischen 1,3 MPa und 1,4 MPa. In Schacht 2 liegt die Injektionsrate derzeit bei knapp 6 ml/h. Die Sensordaten zeigen eine vollständige Aufsättigung und einen Quelldruckaufbau (radiale Spannung derzeit 2,7 MPa) des unteren Dichtsegments sowie eine langsamere Aufsättigung der überliegenden Dichtsegmente. In DS3 und DS4 zeigen die ERT- und TDR-Messungen größere Lösungszutritte aus dem Gebirge. Dies führte zur Vermutung einer hydraulisch wirksamen Verbindung zwischen den beiden Schächten. Derzeit wird die Machbarkeit eines Tests der Hypothese mithilfe eines Helium-Tracer-Versuchs geprüft.

AP2: Im GRS-Labor wurden mechanische Parameter des Feinsands N45 (in Abhängigkeit von der Sättigung) experimentell bestimmt. Der Bedarf zur Überprüfung dieser Parameter ergab sich aus den Arbeiten im DECOVALEX-Task (AP3). Des Weiteren wurde mit der Durchführung von sechs Quelldruckversuchen mit Calcigel im Rahmen eines experimentellen Benchmarks begonnen. Siehe dazu auch 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 und ENSI durchgeführt. Siehe Halbjahresbericht von TUBAF zu 02E12163C. Für den Sandwich-Task innerhalb des Projektes DECOVALEX-2027 wurden drei Interim-Meetings (Februar, März und Juli, online) durchgeführt und eine Synthese der bisherigen Ergebnisse beim 3. Workshop (April, online) präsentiert. Der Task wurde kontinuierlich weiterentwickelt und die Ergebnisse der Teams zusammengeführt. Die Teams haben die Simulation der Quelldruck- und MiniSandwich-Experimente abgeschlossen und arbeiten derzeit an der Simulation des HTV-7 bzw. teilweise von Schacht 1 des In-situ-Versuchs.

AP4: Ein Projektmeeting fand am 25./26.03.25 online statt. Das Sandwich-Projekt wurde mit mehreren Beiträgen beim Waste Management Symposium 2025 (März) in Phoenix sowie beim Mont Terri Technical Meeting (Mai) in Porrentruy vorgestellt.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP1: Weiterführung von Aufsättigung und Monitoring der Verschlusssysteme in den beiden Experimentalschächten, möglicherweise in Kombination mit einem Tracer-Versuch.

AP2: Fortsetzung der beschriebenen Quelldruckversuche. Siehe auch Halbjahresbericht von KIT und TUBAF zu 02E12163A bzw. 02E12163C.

AP3: Fortsetzung der Modellkalibrierung und der HM Simulationen mit dem verbesserten Doppelstruktur-Materialmodell sowie durch Ergebnisse aus DECOVALEX-2027.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Friedenberg, L. & Hinze, M.: Hydraulic-Mechanical Coupled Modeling of the Sandwich Shaft Sealing System, Waste Management 2025 Conference, March 9 - 13, 2025, Phoenix, Arizona, USA.

Hinze, M. et al.: Multi-Scale Testing and Simulation of a Vertical Hydraulic Sandwich Sealing System, Waste Management 2025 Conference, March 9 - 13, 2025, Phoenix, Arizona, USA.

Hinze, M. et al.: Monitoring and Interpretation of Multi-Physical Data from the Sandwich Shaft Sealing Experiment at the Mont Terri Rock Lab, Waste Management 2025 Conference, March 9 - 13, 2025, Phoenix, Arizona, USA.

Hinze, M. et al.: SW-A experiment: Interpretation of recent measurement data, Mont Terri Technical Meeting 2025 (TM-42), 13 May 2025, Porrentruy, Switzerland.

Antragssteller(in) / ausführende Stelle: Institut für Geotechnik, TU Bergakademie Freiberg, Gustav-Zeuner-Str. 1, 09599 Freiberg		Förderkennzeichen: 02 E 12163C
Vorhaben (Thema/Titel): Verbundprojekt: Vertikales hydraulisches Dichtsystem nach dem Sandwich-Prinzip – Hauptprojekt Phase 2 (Sandwich-HP2), Teilprojekt C		
Themenbereich des Fördervorhabens: 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: 01.01.2025 bis 30.06.2025
Gesamtkosten des Vorhabens: 456.512,00 EUR		Projektleitung: 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 Schachtverschlusssysteme 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 03.02.2025 wurde die Fluidzufuhr in HTV-9 nach zwei Jahren Laufzeit beendet. Bis dahin wurden 218 dm³ Pearson Water vom Typ A.3 in das System eingespeist, 173 dm³ von unten über ein Schotterwiderlager und 45 dm³ über die in die ES3 mündende Anschlussleitung. Der Porendruck wurde anschließend stufenweise reduziert. Nach Abfallen der Spannungen im System stiegen die Spannungen nach den kurzzeitigen Entlastungen immer wieder etwas an. Vom 18.02.2025 bis zum 03.04.2025 wurde der Versuch zurückgebaut und der Aufbau in 20 horizontalen Ebenen beprobt. Im Ausbauzustand zeigte sich, dass die Flüssigkeit das DS4 nur bis in den mittleren Bereich befeuchtet hatte. Der obere Bereich des DS4 war nahezu unbeeinflusst geblieben. Auch das obere Schotterwiderlager war trocken geblieben. Insgesamt wurden 606 Proben gewonnen. An 380 Proben davon wurde der Wassergehalt nach 105°C-Trocknung bestimmt und am Bentonit zusätzlich nach 200°C-Trocknung. Der andere Teil der Proben wurde für vergleichende Untersuchungen am KIT bei Umgebungstemperatur an der Luft gelagert. Die Proben aus der Wassergehaltsbestimmung und aus der Luftlagerung wurden für die Weiteruntersuchung an das KIT gegeben. Außerdem wurden die Segmente in ihrer Teufenlage ausgemessen. Für den HTV-10 wurde die vertikale Anordnung der Verschiebungssensoren in der Druckzelle geplant (EURAD-2 ANCHORS).

AP3: Für den entwickelten Benchmarktest für Doppelstrukturmodelle (vgl. letzter ZB) wurde eine analytische Lösung mittels einer Teillinearisation des gekoppelten Differentialgleichungssystems hergeleitet. Die anschließende Codeverifikation ermöglichte Korrekturen der Implementierungen in OpenGeoSys und CODE_BRIGHT. Mit einem im Kontext der experimentellen Ungewissheiten vereinfachten Bentonitmodell wurden ausgehend von der Kalibrierung nun Simulationen von Mini-Sandwich- und HTV-Versuchen durchgeführt. Aus den Ergebnissen auf unterschiedlicher Skala kann der Bedarf komplexerer (v.a. hydraulischer) Ansätze klar motiviert werden. Dabei soll nichtlineares elastisch-plastisches Verhalten mit einer variablen Permeabilität unter Einbindung des Doppelstrukturmodells zusammengeführt werden (Nutzung MFront, siehe [1]). Für das Quellverhalten wird die experimentelle Beobachtung von Trockendichtegradienten beim Einbau sowie die Abhängigkeit der maximalen Quellspannung von der Trockendichte berücksichtigt. In Studien zur Wandreibung erwiesen sich diese Effekte als qualitativ entscheidend. Dadurch können Unterschiede in den Axialspannungen unterschiedlicher Oedometerversuche erklärt werden.

AP4: Die Zusammenarbeit mit der Modellierung im Sandwich-Task in DECOVALEX-2027 wurde fortgeführt. Es erfolgten weitere Abstimmungen mit dem EURAD-2 Projekt ANCHORS hinsichtlich der Erweiterung der HTV Messtechnik.

4. Geplante Weiterarbeiten

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

AP2: Fortführung Kennwertbestimmung HTV-9. Vorbereitung / Kalibrierung HTV-10.

AP3: Abschluss der Wandreibungsstudie; Fortführung HTV Modellierung

5. Berichte, Veröffentlichungen

[1] T. Helfer, M. Wangermez, E. Simo, T. Nagel, C.B. Silbermann, L. Riparbelli. The MFrontGallery project. J Open Source Softw, 10(109), 7742, 2025.

[2] V. Kumar, S. Beese, T. Nagel. Investigation of retention behaviour in hierarchical multiscale porosity domains. XI International Conference on Coupled Problems in Science and Engineering. 26-29 May 2025, Villasimius, Italy.

Antragssteller(in) / ausführende Stelle: Technische Universität Bergakademie Freiberg, Akademiestr. 6, 09599 Freiberg		Förderkennzeichen: 02 E 12173
Vorhaben (Thema/Titel): Entwicklung eines salzgrusbasierten Versatzkonzeptes unter der Option Rückholbarkeit – Phase 2 (SAVER)		
Themenbereich des Fördervorhabens: C2.3 Geotechnische und technische Barrieren		
Laufzeit des Vorhabens: 01.11.2023 bis 31.10.2025		Berichtszeitraum: 01.01.2025 bis 30.06.2025
Gesamtkosten des Vorhabens: 473.576,00 EUR		Projektleitung: 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 durch den Einbau von POLLUX-Modellkörpern mit angenäherter Realgröße weiter gesteigert. 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 durch die TUBAF und verschiedene Projektpartner untersucht (das komplette Laborprogramm kann der Vorhabensbeschreibung entnommen werden). 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. Die gemessenen Differenzdrücke in den QSV-Bereichen beider Versatzkörper sind abnehmend, während die gemessenen Setzungen ebenfalls rückläufig sind. Dies spricht für eine einsetzende Änderung der Spannungsverhältnisse im hinteren Bereich, vermutlich herbeigeführt durch die zunehmende Sohlenkonvergenz. In den vorderen Bereichen, welche mit GESAV- und KOMPASS-Material verfüllt wurden, kann keine Änderung festgestellt werden. Es wurden zudem nochmals andere kapazitive Sensoren getestet, welche eine qualitative Messung auf Labormaßstab ermöglicht haben. Für zukünftige FuE-Projekte wäre eine tiefergehende Eignungsprüfung ggf. sinnvoll. (AP 1.1 + AP 1.2)

AP2: Das IfG hat die Untersuchungsergebnisse der untersuchten Proben am 28.5.2025 bereitgestellt. Je nach Konsolidierung der Proben wurden verschiedene Tests durchgeführt. Für die Proben aus dem QSV-Bereich ergaben sich mittlere Dichten von $1,45 \text{ g/cm}^3$, während die GESAV-Proben eine mittlere Dichte von $1,38 \text{ g/cm}^3$ und die KOMPASS-Proben $1,46 \text{ g/cm}^3$ aufwiesen. Zum Vergleich wurde eine Entnahme einer In-Situ-Probe aus einem GESAV-Versatzkörper von 2019 durchgeführt, welche eine Dichte von $1,68 \text{ g/cm}^3$ aufwies. Daraus lässt sich schlussfolgern, dass die Entnahme mit KG-Rohrprobegefäßen zur Abschätzung der In-Situ-Einbaudichte nur einen groben Orientierungswert darstellt. Eine nachträgliche Verdichtung um $0,3 \text{ g/cm}^3$ ist auszuschließen. Die niedrigste Permeabilität der GESAV-Proben lag bei $1,37 \cdot 10^{-13} \text{ m}^2$ und beim KOMPASS-Material bei $1,1 \cdot 10^{-14} \text{ m}^2$. Alle weiteren Ergebnisse werden im Abschlussbericht ausgewertet. Die Visualisierung der Scherspannungsverläufe wird bis dahin vom IfG bereitgestellt (AP2.1). Bei der parallel durchgeführten In-Situ-Probenahme konnten keine geochemischen Veränderungen beider Versatzkörper festgestellt werden. Wie im letzten Bericht erwähnt, gestaltete sich die In-Situ-Entnahme von Probekernen mittels Diamantbohrtechnik als technisch nicht durchführbar. Daher wurde versucht Probekörper herauszuschneiden, was ebenfalls fehlschlug (AP2.2). Es konnte bis dato keine Feuchtigkeitsmigration in die trocken verschleuderten Versatzkörperbereiche nachgewiesen werden (AP2.3).

Die aufgenommenen Daten aus Labor und In-Situ-Versuchen werden kontinuierlich in lokale Datenbanken eingepflegt und visuell in Excel ausgewertet. Die Bereitstellung für interessierte Forschungspartner soll mit der internen TUBAF-Cloud gehostet werden. Aktuell werden die Daten dafür aufbereitet (AP2.4).

4. Geplante weitere Arbeiten

AP1: Der Weiterbetrieb und das kontinuierliche Auslesen und Auswerten der untertägig generierten Daten wird entsprechend des Projektplanes weitergeführt. Der mögliche Weiterbetrieb der Versuchsstände im FuE-Projekt „VeGAS“ soll geprüft werden. Das Projekt soll im Herbst beim PK11 nochmal vorgestellt werden. Bei negativem Bescheid ist der Rückbau mit der GSES zu koordinieren. Die geplante kostenneutrale Verlängerung soll u. a. den Weiterbetrieb der Versuchsstände enthalten, um so einen Anschluss an das Projekt „VeGAS“ und eine entsprechende Wartung sicherzustellen (AP1.1+1.2).

AP2: Da zu Projektbeginn nicht klar war, wie viele Proben tatsächlich dem gesamten geplanten Laborprogramm des IfG unterzogen werden können, wurde eine Schätzung abgegeben. Nach der Auswertung hat sich gezeigt, dass von den Kosten, welche für das IfG veranschlagt wurden, bis dato lediglich ca. 19.000 € netto benötigt wurden. Da die Blockprobennahme durch die TUBAF technisch nicht realisierbar war und weitere Laborbeprobungen der vorhandenen Proben zu keinem signifikanten Erkenntnisgewinn führen würden, sollen durch das IfG nochmals aus beiden Versatzkörpern Blockproben entnommen werden. Diese Blockproben sollen dem gleichen Laborprogramm wie die ursprünglich beim Einbau entnommenen Proben unterzogen werden. Dadurch wird eine direkte Vergleichbarkeit der Ergebnisse und die Bewertung der zeitlichen Entwicklung der Materialeigenschaften von Einbau bis ca. 2,5 Jahre danach möglich. In Summe würden dann voraussichtlich 40.000 € brutto der ursprünglich veranschlagtem 89.549,64 € genutzt werden. Für diese Arbeiten, das weiterführende Monitoring sowie die geochemische Überwachung soll eine kostenneutrale Verlängerung beim Projektträger beantragt werden (AP2.1+AP2.2).

Die Untersuchung von Wechselwirkungen wird durch die Auswertung der untätig ausgelesenen Daten weiter durchgeführt (AP2.3). Die Datenaufbereitung für die Cloud-Bereitstellung und einfache Verständlichkeit sowie Interaktion wird fortgeführt (AP2.4)

5. Berichte, Veröffentlichungen

Zusätzlich zu den bereits publizierten Veröffentlichungen wurden zwei Abstracts erfolgreich auf dem Waste Management Symposium in Phoenix eingereicht. Das Projekt und assoziierte Forschung wurden sowohl in einem Fachvortrag vor internationalem Publikum als auch in zwei Poster-Sessions auf der Konferenz vorgestellt. In den Proceedings sind beide Veröffentlichungen zu finden. Die Proceedings sollten in den kommenden Wochen veröffentlicht werden, können aber bereits durch registrierte Teilnehmer des WMSYM eingesehen werden. Die TUBAF konnte somit aktiv zur Sichtbarkeit der durch das BMUV und PTKA geförderten Projekte beitragen. Die Forschungsergebnisse stießen auf reges Interesse. Einer der Nachwuchswissenschaftler erhielt das renommierte Roy G. Post Foundation Stipendium.

Poster Session:

Investigation and Findings of Optimization Approaches for High-Level Waste Disposal in Rock Salt Formations - Louis Schaarschmidt, TU Bergakademie Freiberg (Germany); Helmut Mischo, TU Bergakademie Freiberg (Germany)

Presentation:

Practical Model Approach for Relationship Between HLW-Container Emplacement Position and the Spatial Thermal Radiation - Louis Schaarschmidt, TU Bergakademie Freiberg (Germany); Helmut Mischo, TU Bergakademie Freiberg (Germany); Ibrahim Alsalam, TU Bergakademie Freiberg (Germany)

Antragssteller(in) / ausführende Stelle: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 12194
Vorhaben (Thema/Titel): Interaktionen zwischen den geotechnischen Barrieren eines Endlagers für nukleare Abfälle in tonreichen Sedimentgesteinsformationen – Phase 1 (INTERESE – Phase 1)		
Themenbereich des Fördervorhabens: 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: 01.01.2025 bis 30.06.2025	
Gesamtkosten des Vorhabens: 819.421,00 EUR	Projektleitung: 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-2/ 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-2/ ANCHORS-Vorhaben eingebettet.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im Rahmen der **AP1** und **2** hat das zweitägige Projekt-Kick-Off-Meeting mit den internationalen Vorhabenspartnern und Gästen stattgefunden. Darüber hinaus sind die Sichtung, Zusammenstellung und Synthese der relevanten Literatur weitergeführt worden.

Im **AP4** sind die grundlegenden geotechnischen Parameter potenzieller VuV-Materialien sowie deren Kompaktionsverhalten ermittelt bzw. analysiert worden. Die Ergebnisse sind durch neue experimentelle Ansätze und Daten ergänzt worden, die im Rahmen eines zweimonatigen internationalen studentischen Pflichtpraktikums entwickelt bzw. generiert worden sind. Basierend auf den Daten ist mit der Charakterisierung potenzieller VuV-Materialien im Hinblick auf ihr Volumenänderungs- sowie Fluidretentions- und transferverhalten begonnen worden.

Im **AP6** ist mit der experimentellen Analyse des zeitabhängigen Einflusses der Lösungseigenschaften und -zusammensetzung auf das Volumenänderungs- und Fluidtransferverhalten eines potenziellen VuV-Materials parallel bei GRS und an der Universität von Jyväskylä begonnen worden. Die Analysen ergänzen sich, um die im Mikro- und Zentimetermaßstab ablaufenden Prozesse besser miteinander zu verknüpfen.

Es ist im **AP7** damit fortgefahren worden, den Einfluss der Interaktionen auf die Funktion eines abstrahierten Versatz/Verschlussbauwerk-Systems im Zentimetermaßstab zu analysieren. Des Weiteren ist im Rahmen des EURAD-2/ ANCHORS-Vorhabens mit einem Vergleichsprogramm für Quelldruckexperimente begonnen worden. Die ersten Ergebnisse sind im Berichtszeitraum während des zweiten Meetings in Montpellier (FR) besprochen und später in Form eines Deliverables veröffentlicht worden.

4. Geplante Weiterarbeiten

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

5. Berichte, Veröffentlichungen

Pintado, X., Svoboda, J. Miettinen, A. (2025) Deliverable to Milestone 32: Definition of the Experimental benchmarking. Work package 10 ANCHORS. EURAD-2. Grant agreement N° 101166718

Antragssteller(in) / ausführende Stelle: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 12214A
Vorhaben (Thema/Titel): Verbundprojekt: Multi-scale experimental and numerical analysis of crushed salt material used as engineered backfill for a nuclear waste repository in rock salt (MEASURES)		
Themenbereich des Fördervorhabens: 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: 01.01.2025 bis 30.06.2025
Gesamtkosten des Vorhabens: 772.844,00 EUR		Projektleitung: Larissa Friedenberg

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

Während des Berichtszeitraums fanden mehrere Interim Meetings der Expertengruppen Labor, Mikrostruktur und Modellierung statt, in denen das weitere Vorgehen in den einzelnen Arbeitspaketen besprochen wurde.

Die Laborgruppe identifizierte in ihren Diskussionen die Notwendigkeit der Charakterisierung der „sample-to-sample variability“ und diskutierte eine mögliche Umsetzung. Außerdem wurde gemeinschaftlich über die Auswerteprozeduren bei Kompaktionstests diskutiert und eine bessere Abstimmung hierbei beschlossen.

Die Mikrostrukturgruppe entwickelte ein Konzept zur Durchführung der Experimente, welche bestimmte mikrostrukturelle Deformationsmechanismen adressieren sollen. Hierfür wurde ein synthetisches Salzgrusmaterial beschafft, welches keine a-priori Mikrostrukturen aufweist.

Die Modellierungsgruppe erarbeitete eine gemeinsame Vorgehensweise und begann bereits mit der Modellierung des Kompaktionstests TK-045, welcher den Einfluss der mittleren Spannung auf die Kompaktion untersucht.

Die GRS als Projektkoordinatorin übernahm die Organisation der Interim Meetings, die Durchführung von Triaxialexperimenten in AP1.1 und beteiligt sich mit dem Simulationscode CODE_BRIGHT an den Modellierungsarbeiten. Außerdem stellte sie das Projekt im internationalen Rahmen auf dem Waste Management Symposia in Phoenix vor.

4. Geplante Weiterarbeiten

Bearbeitung des Projekts anhand der Arbeitspakete aus Punkt 2.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Friedenberg, L., Bartol, J., Beese, S., Coulibaly, J. B., Düsterloh, U., Gartzke, A.-K., Hangx, S., Jantschik, K., Kirby, M., Laurich, B., Lerch, C., Lerche, S., Li, L., Lüdeling, C., Mills, M. M., Naumann, D., Norris, S., Oosterhout, B. van, Rahmig, M., Zemke, K. (2025). Multi-Scale Experimental and Numerical Analysis of Crushed Salt Used as Engineered Backfill in a Rock Salt Repository - 25062. In I. N. WM SYMPOSIA (Chair), Waste Management Symposia 2025, Phoenix

Antragssteller(in) / ausführende Stelle: BGE TECHNOLOGY GmbH, Eschenstraße 55, 31224 Peine		Förderkennzeichen: 02 E 12214B
Vorhaben (Thema/Titel): "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"		
Themenbereich des Fördervorhabens: 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: 01.01.2025 bis 30.06.2025
Gesamtkosten des Vorhabens: 383.875,00 EUR		Projektleitung: 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.

Dabei erfolgt eine Zusammenarbeit mit den Kooperationspartnern Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit gGmbH (GRS), Institut für Gebirgsmechanik GmbH (IfG), Technische Universität Clausthal (TUC) und der Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR).

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

Allgemeines

Im Berichtszeitraum fanden mehrere „Interim Meetings“ der Expertengruppen Labor, Mikrostruktur und Modellierung statt. Die BGE TEC nahm dabei in der Laborgruppe und in der Modellierungsgruppe teil. Dort wurde das Vorgehen in den einzelnen Arbeitspaketen diskutiert und koordiniert.

Die Modellierungsgruppe legte eine gemeinsame Vorgehensweise fest. Als erster Versuch sollte der Kompaktionstest TK-045 nachmodelliert werden. Dieser Versuch ist besonders geeignet den Einfluss der mittleren Spannung auf die Kompaktion des Salzgruses zu untersuchen.

Die Laborgruppe identifizierte in ihren Diskussionen die Notwendigkeit der Charakterisierung der „sample-to-sample variability“ und diskutierte eine mögliche Umsetzung. Außerdem wurde gemeinschaftlich über die AuswerteprozEDUREN bei Kompaktionstests diskutiert und eine bessere Abstimmung hierbei beschlossen.

Die Arbeiten der BEG TEC erfolgten in den **Arbeitspaketen 3 und 4**.

AP 3.1

Der Versuchs TK-045 und dessen Ergebnisse wurden aufbereitet. Der Einfluss unterschiedlicher Glättungsmethoden bei der Versuchsauswertung wurden analysiert. Dann wurde der Versuch TK-045 mit den Bestandsparametern aus dem KOMPASS-II Projekt nachgerechnet und die Abweichungen zwischen den Berechnungsergebnissen und dem Experiment diskutiert.

Zudem erfolgten weitergehende Überlegungen unter Berücksichtigung aktueller Ergebnisse der Projektpartner zur Möglichkeit der Integration weiterer Teilprozesse in das Stoffmodell.

AP 3.2

Das numerisch implementierte Stoffmodell wurde auf die für das Projekt zu nutzende Softwareversion mit Berücksichtigung von Optimierungsmöglichkeiten aktualisiert.

AP 4

Die erzielten Zwischenergebnisse in den Arbeiten in AP 3.1 und AP 3.2 wurden parallel dokumentiert.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP 3.1 und 3.2

Die Bearbeitung des Projekts anhand der Arbeitspakete aus Punkt 2 wird weitergeführt.

Die Arbeiten zur Erweiterung des Stoffmodells der BGE TEC für Salzgrus werden fortgesetzt. Unter Nutzung der Daten des Laborexperimentes TK-045 wird das Stoffmodell im nächsten Schritt neu parametrisiert beziehungsweise wird die Parametrisierung angepasst.

Nach der Auswertung des Versuches TK-045 sollen weitere Versuche entsprechend der festgelegten Vorgehensweise der Laborgruppe entsprechend analysiert, ausgewertet, und zur Parameteridentifikation sowie Stoffmodellanpassung herangezogen werden.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Friedenberg, L., Bartol, J., Beese, S., Coulibaly, J. B., Düsterloh, U., Gartzke, A.-K., Hangx, S., Jantschik, K., Kirby, M., Laurich, B., Lerch, C., Lerche, S., Li, L., Lüdeling, C., Mills, M. M., Naumann, D., Norris, S., Oosterhout, B. van, Rahmig, M., Zemke, K. (2025). Multi-Scale Experimental and Numerical Analysis of Crushed Salt Used as Engineered Backfill in a Rock Salt Repository - 25062. In I. N. WM SYMPOSIA (Chair), Waste Management Symposia 2025, Phoenix

Antragssteller(in) / ausführende Stelle: IfG Institut für Gebirgsmechanik GmbH, Friederikenstraße 60, 04279 Leipzig		Förderkennzeichen: 02 E 12214C
Vorhaben (Thema/Titel): Verbundprojekt: Multi-scale experimental and numerical analysis of crushed salt material used as engineered backfill for a nuclear waste repository in rock salt (MEASURES)		
Themenbereich des Fördervorhabens: 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: 01.01.2025 bis 30.06.2025
Gesamtkosten des Vorhabens: 337.741,00 EUR		Projektleitung: Dr. Johannes Kupper

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

Die aus den Forschungsvorhaben KOMPASS I und KOMPASS II bereits vorliegenden Laborergebnisse von Kompaktionsversuchen wurden einer eingehenden Analyse unterzogen. Dabei wurden die einzelnen Versuche in Versuchsphasen mit vergleichbaren Versuchsparametern unterteilt, um ein besseres Verständnis dahingehend zu erlangen, welchen Einfluss der jeweilige Versuchsparameter auf das Kompaktionsverhalten des Salzgruses hat. Im Anschluss an diese Analyse wurde damit begonnen den bisherigen Stoffmodellansatz des IfG für die Salzgruskompaktion zu überarbeiten. Dabei wurde versucht für jeden Versuchsparameter einen funktionellen Zusammenhang zur Porosität und damit der Festigkeit des Salzgruses herzustellen.

Des Weiteren wurde damit begonnen eine neue Oedometerzelle zu konstruieren. Diese Zelle soll zukünftig bei Kompaktionsversuchen zum Einsatz kommen und dabei bessere Messmöglichkeiten hinsichtlich des Versatzdrucks bieten.

4. Geplante Weiterarbeiten

Im nächsten Schritt werden wir die Analyse der vorliegenden Labordaten weiter verfeinern und somit die funktionellen Zusammenhänge zwischen den Versuchsparametern und der Porosität des Versatzes verbessern.

Die Konstruktionsarbeiten an der neuen Oedometerzelle werden fortgesetzt und mit dem Aufbau der Zelle begonnen.

5. Berichte, Veröffentlichungen

- keine -

Antragssteller(in) / ausführende Stelle: TU Clausthal - Lehrstuhl für Geomechanik und multiphysikalische Systeme		Förderkennzeichen: 02 E 12214D
Vorhaben (Thema/Titel): Verbundprojekt: Multi-scale experimental and numerical analysis of crushed salt material used as engineered backfill for a nuclear waste repository in rock salt (MEASURES)		
Themenbereich des Fördervorhabens: 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: 01.01.2025 bis 30.06.2025
Gesamtkosten des Vorhabens: 498.630,00 EUR		Projektleitung: 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

Zu AP1.1

Neue Prozedur zur Salzgrusvorkompaktion – in Triaxialzellen

Im Fachgespräch der Expertengruppe „Laborative Untersuchungen“ am 10.02.2025 stellte der Antragssteller(in) / ausführende Stelle: (TUC) die geplante neue Prozedur zur Salzgrusvorkompaktion vor, die eine rege Zustimmung der Projektpartner fand. Im Gegensatz zur bisher angewandten Vorgehensweise der Vorkompaktion in einer Drucklagerungszelle unter einem ebenen Verzerrungszustand (plain-strain conditions) erfolgt die Vorkompaktion nun in Triaxialzellen unter einer nahezu isotropen Belastung.

Die Vorteile der neuen Methode liegen zum einen

- in der bei dem bisherigen Vorgehen nicht gegebenen kontinuierlichen Messwerterfassung während des Versuchs (Axial- und Mantelspannung, sowie axiale und volumetrische Deformation) und weiterhin
- in der Möglichkeit der Realisierung einer der Hauptzielsetzungen des AP1.1: Lieferung von einer Mehrzahl an den Proben zur Überprüfung der Reproduzierbarkeit der Vorgehensweise sowie der Vergleichbarkeit, der Homogenität und der Isotropie der Proben nach der Vorkompaktion.

Die nennenswerte Erhöhung der Anzahl der vorkompaktierten Proben ist durch den Einsatz einer Vierer-Triaxialzellenanlage ermöglicht.

Erste Versuchsergebnisse – Nachweis der Machbarkeit/Realisierbarkeit

Im Berichtszeitraum wurden die Anlagen, der Anlagenraum sowie die Anlagensoftware zur Durchführung der Versuche an einem losen Material ertüchtigt und die ersten zwei Einzelvorversuche in Dauer jeweils von ca. 1 Monat erfolgreich realisiert. Im Rahmen der Realisierung dieser zwei Versuche wurde die neue Vorgehensweise Schritt für Schritt optimiert (betreffend sowohl den Probenherstellungsprozess sowie die Versuchsdurchführung). Die Ergebnisse der beiden Testversuche bestätigen die Machbarkeit/Realisierbarkeit der neuen Vorgehensweise. Um die Reproduzierbarkeit der Versuchsergebnisse und somit die Vergleichbarkeit der vorkompaktierten Proben zu überprüfen, sind weitere Schritte notwendig und vorgesehen (Vervielfältigung der Versuche durch die Anwendung der Viereranlage).

Zu AP1.2

Das neu erprobte Vorgehen zur Vorkompaktion mit der detaillierten Erfassung der Messwerte während des Versuchs gibt die *Möglichkeit* nicht nur *Probekörper* für weitere Untersuchungen, sondern auch gleichzeitig die *Datenbasis* zur Abbildung des Kompaktionsverhaltens von KOMPASS Material im Bereich der *höheren Porosität* (ca. 30%-15%) zu erstellen.

Zu AP3.1

Für das zur *Benchmark* Nachrechnung festgelegte Versuch TK-045 wurde die numerische Analyse mit dem im Rahmen von Vorprojekt entwickelten Stoffmodell EXPO-COM durchgeführt. Vorerst wurde der Materialparametersatz aus dem Vorprojekt (ermittelt anhand des zweijährigen Versuchs TUC-V2) direkt angewendet, ohne die Parameteranpassung. Das Ziel dieser Nachrechnung ohne Parameteranpassung ist die Überprüfung und Bewertung der Eignung der Parameter sowie der Stoffmodellformulierung zur zutreffenden Abbildung weiterer Versuche am KOMPASS Material (aus unterschiedlichen Laboren, für unterschiedliche Belastungsrandbedingungen, Porositätsbereiche usw.). Erste Ergebnisse der Nachrechnung mit dem Stoffmodell EXPO-COM zeigen gute Übereinstimmung der rechnerischen Ergebnisse mit den Messergebnissen und weisen somit vorerst auf keinen weiteren Entwicklungsbedarf/keinen zu behebenden Mangel bezüglich der physikalischen Modellierung mit dem Stoffmodell.

4. Geplante Weiterarbeiten

Zu AP1.1

- Eine detaillierte *Auswertung* der ersten zwei Einzeltestversuche für die Vorkompaktion.

- Durchführung der *ersten Testserie* an der Viereranlage zur Erstellung von vier vorkompaktierten Proben (*trocken*).
- *Auswertung* der Messergebnisse der ersten Testserie an der Viereranlage zur Erstellung von einer Datenbasis für das Kompaktionsverhalten im Bereich hoher Porosität sowie zur Überprüfung der *Reproduzierbarkeit / Ähnlichkeit* der Proben (*trocken*).
- Durchführung der *zweiten Testserie* an der Viereranlage zur Erstellung von vier vorkompaktierten Proben (*feucht* mit dem *Feuchtegrad* von $w = 1\%$).
- *Auswertung* der Messergebnisse der zweiten Testserie an der Viereranlage zur Erstellung von einer Datenbasis für das Kompaktionsverhalten bei unterschiedlichen Feuchtegraden sowie zur Überprüfung der *Reproduzierbarkeit / Ähnlichkeit* der Proben (*feucht* mit dem Feuchtegrad von $w = 1\%$).

Zu AP1.2

Auswertung, Aufbereitung und Zurverfügungstellung der Messergebnisse den Projektpartnern: zur Untersuchung des Kompaktionsverhaltens von KOMPASS Material im Bereich der höheren Porosität (ca. 30%-15%) sowie in Abhängigkeit vom Feuchtegrad (produziert unter anderem im Rahmen von AP1.1).

Zu AP3.1

Fortsetzung der Reihe der Benchmark Nachrechnungen mit den Kompaktionsversuchen von TUC und BGR zur weiteren Validierung der Eignung der Stoffmodellformulierung sowie des aktuellen Materialparametersatzes für eine zutreffende Abbildung des Materialverhaltens von KOMPASS Salzgrusmaterial für unterschiedliche Belastungsrandbedingungen (isotrop, deviatorisch), für unterschiedliche Porositätsbereiche sowie unterschiedliche Feuchtegrade. Somit werden die Gültigkeitsbereiche der Stoffmodellformulierung sowie ggfls. der Weiterentwicklungsbedarf/Optimierungsbedarf festgestellt. Im Falle eines festgestellten Bedarfs ist die Materialparameteranpassung bzw. die Weiterentwicklung der Stoffmodellformulierung vorgesehen.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Friedenberg, L., Bartol, J., Beese, S., Coulibaly, J. B., Düsterloh, U., Gartzke, A.-K., Hangx, S., Jantschik, K., Kirby, M., Laurich, B., Lerch, C., Lerche, S., Li, L., Lüdeling, C., Mills, M. M., Naumann, D., Norris, S., Oosterhout, B. van, Rahmig, M., Zemke, K. (2025). Multi-Scale Experimental and Numerical Analysis of Crushed Salt Used as Engineered Backfill in a Rock Salt Repository - 25062. In I. N. WM SYMPOSIA (Chair), Waste Management Symposia 2025, Phoenix

Antragssteller(in) / ausführende Stelle: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 12224A
Vorhaben (Thema/Titel): Rückhaltung und Löslichkeit dosisrelevanter Radionuklide unter den reduzierenden Nahfeldbedingungen eines Endlagers in Ton- oder Kristallingestein. Teilprojekt A (RULET)		
Themenbereich des Fördervorhabens: 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: 01.01.2025 bis 30.06.2025
Gesamtkosten des Vorhabens: 533.752,00 EUR		Projektleitung: 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: Die Herstellung von Stannat(IV)-Stammlösungen zur Durchführung von Löslichkeitsversuchen und isopiastischen Messungen wurden begonnen. Außerdem wurde der Vergleich thermodynamischer Daten zu M(IV)-haltigen Lösungssystemen eingeleitet.

AP2 und AP3: Aus dem mineralogischen Fachhandel wurden ein eisenhaltiges Carbonat und ein eisenhaltiges Tonmineral beschafft und chemisch sowie durch Röntgendiffraktometrie charakterisiert. Die Minerale wurden auch den Projektpartnern zur Verfügung gestellt.

Auf Basis dokumentierter früherer Arbeiten wurde ein Syntheseweg für eisen(II)-haltige Phyllosilikate identifiziert und weiterentwickelt. Der Ansatz führte noch nicht zum angestrebten Resultat. Es wird versucht durch Variation des Syntheseweges ein geeigneteres Produkt zu erhalten.

AP5: Gemeinsam mit dem HZDR wurden die Vorbereitungen für den gemeinsamen Workshop RULET/TecRad (NukSiFutur-Nachwuchsgruppe) abgeschlossen. Er findet im November 2025 statt und steht Nachwuchswissenschaftlerinnen und -wissenschaftlern aus diesen beiden Projekten aber auch inhaltlichen ähnlich gelagerten Forschungsgruppen offen.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP1: Fortführung Zusammenstellung von Daten (Löslichkeiten, Komplexbildung, Aktivitätskoeffizienten) zu Systemen mit vierwertigen Metallionen (M^{IV})

Abschluss der Synthese und Charakterisierung von Stammlösungen von Natrium- und Kaliumstannat(IV) zur Verwendung in isopiastischen und Löslichkeitsuntersuchungen.

AP2: Optimierung der Methodik zur Synthese von Fe(II)-haltigen Tonmineralen

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine

Antragssteller(in) / ausführende Stelle: Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e.V. Bautzner Landstrasse 400, 01328 Dresden		Förderkennzeichen: 02 E 12224B
Vorhaben (Thema/Titel): Verbundprojekt: Rückhaltung und Löslichkeit dosisrelevanter Radionuklide unter den reduzierenden Nahfeldbedingungen eines Endlagers im Ton- oder Kristallingestein (RULET), Teilprojekt B		
Themenbereich des Fördervorhabens: 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: 01.01.2025 bis 30.06.2025
Gesamtkosten des Vorhabens: 646.501,00 EUR		Projektleitung: 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: Die Doktorandenstelle wurde im Juni besetzt. Literaturrecherche zur Synthese und Charakterisierung von Eisen(II)haltigen Carbonaten und Retentionsprozessen an vergleichbaren Eisen(II)-haltigen Mineralphasen.

AP 5: Planung des RULET Vernetzungsworkshops. Dieser wird vom 24. bis 27.11.2025 am HZDR stattfinden und mit Aktivitäten der BMBF geförderten NukSiFutur Nachwuchsgruppe TecRad abgestimmt. Programmplanung und Einladung der Gastredner, Abstract-Einreichung, Organisatorisches

4. Geplante Weiterarbeiten

AP 1, AP 3: Zusammenstellung der Literaturrecherche, Auswahl, Synthese und erste Charakterisierung der Fe^{II}-Carbonatmineralphasen. Erste Testversuche zur Retention von Technetium

AP 5: Detailplanung und Durchführung des Workshops

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine

Antragssteller(in) / ausführende Stelle: Karlsruher Institut für Technologie (Großforschungsaufgabe) Institut für Nukleare Entsorgung (INE)		Förderkennzeichen: 02 E 12224C
Vorhaben (Thema/Titel): Verbundprojekt: Rückhaltung und Löslichkeit dosisrelevanter Radionuklide unter den reduzierenden Nahfeldbedingungen eines Endlagers im Ton- oder Kristallingestein (RULET), Teilprojekt C		
Themenbereich des Fördervorhabens: 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: 01.01.2025 bis 30.06.2025
Gesamtkosten des Vorhabens: 547.253,00 EUR		Projektleitung: 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

In diesem 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 Doktorarbeiten sollen in den Arbeitspaketen (i) AP 1 + AP 2 (Tc-99) und (ii) AP2 (C-14) durchgeführt werden.

AP 1: Die Suche nach geeigneten Doktoranden wurde bis April 2025 durchgeführt, jedoch ohne Erfolg. Daher wurde folgende Strategie entwickelt: (i) Die Doktorandenstelle 1 (Tc-99) bleibt erhalten. Eine zu diesem Thema geplante Masterarbeit wird als Promotion fortgeführt. Dies erfordert perspektivisch eine kostenneutrale Verlängerung des KIT-Teilprojekts; (ii) Die Doktorandenstelle 2 (C-14) wird in eine zweijährige Postdoc-Stelle umgewandelt. Diese Strategie wird mit PTKA abgestimmt.

AP 2: Siehe AP1.

AP 3: Keine Aktivitäten.

AP 4: Keine Aktivitäten.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP 1: Keine Aktivitäten geplant.

AP 2: (i) Synthese und Charakterisierung von Fe(II)-Hydroxid- und Silikat-Festphasen; (ii) Sorptionsexperimente mit Tc: kinetische Untersuchungen, Sorptionsisothermen, Bestimmung von Verteilungskoeffizienten (R_d); (iii) Charakterisierung von Tc in der Festphase: XPS- und XAFS-Techniken. *[Arbeiten beginnen im Rahmen einer Masterarbeit, nachfolgend weiterzuführen als Promotionsarbeit in RULET.]*

AP 3: Keine Aktivitäten geplant.

AP 4: Keine Aktivitäten geplant.

5. Berichte, Veröffentlichungen

keine

Antragssteller(in) / ausführende Stelle: Forschungszentrum Jülich GmbH, Institute of Fusion Energy and Nuclear Waste Management – Nukleare Entsorgung (IFN-2)		Förderkennzeichen: 02 E 12224D
Vorhaben (Thema/Titel): Verbundprojekt: Rückhaltung und Löslichkeit dosisrelevanter Radionuklide unter den reduzierenden Nahfeldbedingungen eines Endlagers im Ton- oder Kristallingestein (RULET), Teilprojekt D		
Themenbereich des Fördervorhabens: 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: 01.01.2025 bis 30.06.2025
Gesamtkosten des Vorhabens: 573.943,00 EUR		Projektleitung: Dr. Jenna Poonosamy

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Im Rahmen des Verbundvorhabens RULET soll das Verständnis physikochemischer Prozesse (u. a. 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 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 Stoffausbreitungsmodelle für ein generisches Endlager eingesetzt, um zu prüfen, ob die gewonnenen 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 die 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, insbesondere 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 die Besetzung der Positionen der Nachwuchswissenschaftler. Die Beschaffung eines regelbaren True-Power Lasers (Diodenlaser mit 633 nm Wellenlänge; Ausgangsleistung 50 mW) zur Optimierung der 4D Raman-Spektroskopie/Tomographie der Mikrofluidikanlage ist erfolgt; Installation und Inbetriebnahme wurden erfolgreich abgeschlossen.

Mittels DFT-Simulationen und thermodynamischer Berechnungen wurden im Berichtszeitraum neue Erkenntnisse zur Kinetik des ^{226}Ra -Einbaus in Karbonatminerale gewonnen, die für die Langzeitstabilität unter endlagerspezifischen Bedingungen relevant sind. Es konnte gezeigt werden, dass sich beim Ra-Einbau zunächst Calcit mit einer metastabilen, Ra-reichen Phase mit $R\bar{3}m$ -Symmetrie bildet, gefolgt von ^{226}Ra -armem Calcit und Ra-reichen Karbonaten in Aragonitstruktur, die im Gleichgewicht mit der wässrigen Lösung stehen. Die $R\bar{3}m$ -Phase stellt dabei eine metastabile Zwischenstufe zwischen der Calcit- und der Aragonitstruktur dar, welche die Möglichkeit zum Einbau großer Kationen ($> \text{Ca}^{2+}$) bietet, wobei die Ionenanordnung und Größe der Elementarzelle der Calcit-Struktur erhalten bleibt. Große Ionen mit Radien größer als Ca^{2+} (u. a. Sr^{2+} , Ba^{2+} , Ra^{2+}) stabilisieren dabei die $R\bar{3}m$ -Phase durch Drehung der CO_3^{2-} -Ionen und erhöhen somit der Koordinationszahlen. Zudem konnten die geochemischen Milieubedingen, die zur kinetisch-bedingten Bildung der metastabilen $R\bar{3}m$ -Phase führen, eingegrenzt werden. Des Weiteren wurde bei den DFT-Simulationen eine hypothetische monokline Struktur mit – im Gegensatz zur $R\bar{3}m$ -Struktur – geordneten CO_3^{2-} -Ionen identifiziert, welche möglicherweise ein Endglied der $R\bar{3}m$ -Struktur mit niedrigerer Energie darstellt.

4. Geplante Weiterarbeiten

Die für das zweite Halbjahr 2025 geplanten Arbeiten betreffen sowohl initiale experimentelle Arbeiten zum Einbau von Ra^{2+} und seiner geochemischen Analoga in Karbonatminerale als auch die Fortführung theoretischer Arbeiten zu dieser Fragestellung im Rahmen des AP3. Dies umfasst u. a. initiale Arbeiten zur Anwendung der Tröpfchenmikrofluidik zur Untersuchung der Kristallisationspfade von $(\text{Ba,Ca})\text{CO}_3$ und $(\text{Ra,Ca})\text{CO}_3$. Weitere thermodynamische Berechnungen und DFT-Simulationen dienen der Bestimmung der Gleichgewichtszustände und der Equilibrierungsmechanismen der im System $(\text{Ca,Ra})\text{CO}_3 + \text{H}_2\text{O}$ koexistierenden Phasen im Gleichgewicht mit der wässrigen Lösung unter endlagerrelevanten Bedingungen. Des Weiteren sind die Vorbereitung von Beiträgen für und die Teilnahme an der „Joint TecRad – RULET Autumn School on Technetium and other Fission Products“ am HZDR vorgesehen (AP 5).

5. Berichte, Veröffentlichungen

Rudin, S., Vinograd, V., Deissmann, G., Bosbach, D., Poonosamy, J., 2025. Thermodynamic stability of ^{226}Ra -containing carbonate phases: Atomistic simulations and thermodynamic calculations. Workshop on thermodynamic modeling – Connecting Theory and Application: Tackling Challenges in Surface Complexation and Reactive Transport Modeling, 12 – 14 May 2025, Braunschweig, Germany.

Antragssteller(in) / ausführende Stelle: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 12234A
Vorhaben (Thema/Titel): Bewertung der Integrität von Endlagerbehältern unter Korrosionseinfluss im Kristallingestein: Teilprojekt GRS (Kurztitel: BEnKo)		
Themenbereich des Fördervorhabens: 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: 01.01.2025 bis 30.06.2025
Gesamtkosten des Vorhabens: 414.020 EUR		Projektleitung: Dr.-Ing. Xuerui Wang

1. Vorhabensziele / 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 physikalischer 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

AP1: Die Arbeiten im Arbeitspaket umfassten eine Darstellung der Lastfallannahmen auf Basis der Randbedingungen des Arbeitspakets 2 (AP2), sowie einschlägiger Fachliteratur. Dabei wurden typische Versagensmechanismen wie Ermüdung, Kriechen oder Rissbildung identifiziert und analysiert. Einige an den Behälter gestellte Anforderungen und die daraus abgeleiteten Bewertungskriterien wurden definiert.

AP2: In Kooperation mit BGE TEC wurden Randbedingungen zusammengestellt, die für die Korrosion von Behältern relevant sein können. Der Schwerpunkt lag dabei auf den geochemischen Eigenschaften von Tiefenlösungen, wie sie im Nahfeld eines Endlagers auftreten können. Die noch immer lückenhafte Kenntnislage zu Tiefenlösungen in deutschen Kristallingesteinsvorkommen lässt nur eine grobe Einschätzung der möglichen Bandbreiten zu. Bisherige Daten lassen vermuten, dass in noch im Auswahlverfahren vorhandenen Gebieten eher schwach mineralisierte Wässer auftreten. In bislang unzureichend untersuchten Kristallingesteins-Regionen mit räumlicher Nähe zu Salzlagerstätten sind salinare Tiefenlösungen aber nicht a-priori auszuschließen.

AP3: Die Arbeiten in AP2 bilden die Basis zur Bewertung des Kenntnisstandes korrosiver Prozesse unter in Deutschland relevanten Randbedingungen. Für Kupfer wurden einige Faktoren identifiziert, die eine nähere Klärung vor dem Hintergrund deutscher Randbedingungen erfordern. Einige wichtige offene Fragestellungen für den Workshop wurden auch identifiziert.

AP4: Im Berichtszeitraum wurden in Koordination mit den Arbeiten in AP1 Vorgehensweisen zur Erstellung geeigneter Modelle erarbeitet, um die dort definierten Anforderungen für gängige Behältertypen rechnerisch nachzuweisen. Dies umfasst auch die Definition von Randbedingungen und Eingabedaten, beispielsweise hinsichtlich des Werkstoffverhaltens. Internationale Literatur zu vergleichbaren Rechnungen wurde ausgewertet. Für den Nachweis gegen Beulen unter homogener und asymmetrischer Last wurde die Vorgehensweise mit beispielhaften Daten mit dem FE-Code ANSYS Mechanical erprobt.

AP 5: Regelmäßige AP1/AP4- sowie AP2/AP3-Treffen zwischen GRS und BGE TEC wurden durchgeführt. Außerdem fand ein monatlicher Jour fixe zum Austausch über allgemeine Projektfragen und übergreifende AP-Probleme statt.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP1: Geplant sind weitere Arbeiten zu Versagensmechanismen und die daraus resultierenden Anforderungen an den Behälter. Weitere Bewertungskriterien werden entsprechend abgeleitet.

AP2&AP3: Die Prüfung weiterer metallischer Werkstoffe wird von BGETEC durchgeführt. Auf Grundlage der Ergebnisse aus AP2 und AP3 wird im Laufe des Jahres ein offener Workshop zu offenen Fragestellungen für die zukünftige Forschung sowie zur Versuchsmatrix stattfinden. Es ist geplant hierzu einen Teilbericht zu erstellen.

AP4: Die Erarbeitung von Vorgehensweisen zur Erstellung geeigneter Modelle soll fortgesetzt werden. Die Vorgehensweisen sollen auch für die anderen Versagensmechanismen unter Verwendung beispielhafter Daten erprobt werden.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine

Antragssteller(in) / ausführende Stelle: BGE TECHNOLOGY GmbH		Förderkennzeichen: 02 E 12234B
Vorhaben (Thema/Titel): Methodische Grundlagen zur Bewertung der Integrität von Endlagerbehältern für potentielle Endlagerstandorten im Kristallingestein (BEnKo).		
Themenbereich des Fördervorhabens: C2.1 - Sicherheits- und Endlagerkonzepte C2.3 - Geotechnische und technische Barrieren		
Laufzeit des Vorhabens: 01.11.2024 bis 31.10.2026		Berichtszeitraum: 01.01.2025 bis 30.06.2025
Gesamtkosten des Vorhabens: 299.858,14 EUR		Projektleitung: 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

AP-1: Zusammenstellung der Nachweisverfahren aus dem Vorhaben Christa-II und dem KBS-3-Konzept der SKB / Posiva. Vergleich der Nachweisverfahren und Aufstellung einer Nachweismethodik die Einzelnachweise aus beiden betrachteten Nachweismethodiken enthält. Dabei soll sich zunächst auf die mechanischen Nachweise fokussiert werden. Betrachtete Prozessklassen sind: Einwirkende isotrope Lasten, bspw. Quelldruck von Bentonit oder Auflast eines Gletschers in einer Kaltzeit; einwirkende anisotrope Lasten, bspw. ungleichförmiger Quelldruck von Bentonit und Scherkräfte bspw. ausgelöst im Erdbebenfall. Zusätzlich soll eine Nachweismethodik gegen das Durchkorrodieren einer Korrosionsschutzschicht beschrieben werden. Ebenfalls wird die Diskussion geführt, welche verschiedenen technischen Regelwerke im Rahmen der Nachweisführung genutzt werden könnten, bspw. ASME-Codes. Die Durchführung dieser Arbeiten geschieht in Vorbereitung einer beispielhaften Modellierung eines generischen Behälters im AP-4. Als generische Behältergeometrie für das AP-4 ist die Verwendung des Kupferbehälters aus dem KBS-3 Konzept vorgesehen.

AP-2: Zusammenstellung relevanter Randbedingungen für die Korrosion von Behältermaterialien: Thermische Randbedingungen, hydrologische und hydrochemische Randbedingungen, geophysikalische Randbedingungen, Versatzmaterialien und ihre Eigenschaften sowie mechanische Randbedingungen. Die momentan ermittelten Randbedingungen basieren auf dem aktuellen Stand der Literatur und Endlagerprojekten anderer Länder. Für die Randbedingungen wurden bereits offene Fragen abgeleitet, die entweder durch weitere Recherchen beantwortet werden können oder als offene Fragen in das AP-3 mit eingehen. Bei den Randbedingungen aus Endlagerprojekten anderer Länder wird überprüft, ob diese auf Deutschland übertragbar sind. Zusätzlich erfolgt eine begründete Auswahl sinnvoll zu betrachtender Behältermaterialien. Bei den Behältermaterialien soll sich auf die Werkstoffgruppen der Kupferwerkstoffe und der korrosionsbeständigen Stähle fokussiert werden. Da die Bandbreite der korrosionsbeständigen Stähle sehr groß ist, ist auch hier eine zielgerichtete Auswahl auf einige wenige Typen erfolgt.

AP-3: Diskussion der Zielstellung und des Aufbaus des geplanten Workshops. Einladung und Terminabfrage möglicher Teilnehmer. Abstimmung über den möglichen Aufbau der geplanten Versuchsmatrix.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP-1: Weiterführung der Arbeiten zur Zusammenfassung und Diskussion der Nachweisverfahren, sodass die Modellierungen im AP-4 (GRS) beginnen können.

AP-2: Weiterführung und Abschluss der Arbeiten zur Zusammenstellung der für die Behälterkorrosion relevanten Randbedingungen unter Endlagerbedingungen. Konsolidierung der ermittelten Randbedingungen zu einer Fassung die im Workshop (siehe AP-3) diskutiert werden kann.

AP-3: Beginn der Arbeiten zur Identifizierung der offenen Fragestellungen bezüglich der Behälterkorrosion für die beiden Werkstoffgruppen der Kupferwerkstoffe und der korrosionsbeständigen Stähle. Ausarbeitung einer Versuchsmatrix zum Vorschlag von Versuchen welche die offenen Fragen klären können. Planung und Durchführung eines Workshops mit interessierten Stakeholdern um die zu betrachtenden Randbedingung für Korrosionsuntersuchungen und die Versuchsmatrix mit interessierten Stakeholdern zu diskutieren.

5. Berichte, Veröffentlichungen

keine

Antragssteller(in) / ausführende Stelle: BGE TECHNOLOGY GmbH (BGE TEC)		Förderkennzeichen: 02 E 12244A
Vorhaben (Thema/Titel): Verbundprojekt: KI-unterstützte Stoffmodellierung am Beispiel von Bentonit (KI-Stoff), Teilprojekt A		
Themenbereich des Fördervorhabens: C3.1 Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-) biologische (THMCb-)Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung: C3.3 Werkzeuge der Sicherheitsanalysen		
Laufzeit des Vorhabens: 01.02.2025 bis 31.01.2028		Berichtszeitraum: 01.02.2025 bis 30.06.2025
Gesamtkosten des Vorhabens: 401.731,26 EUR		Projektleitung: Dr. Ulrich Kelka

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Das übergeordnete Ziel dieses Forschungsprojekts besteht darin, die Lücke zwischen Experiment und Simulation im Kontext Bentonit zu verringern. Um dieses Ziel zu erreichen, soll der Prozess der Stoffmodellauswahl und -anpassung mithilfe KI-basierter Methoden unterstützt sowie algorithmisch und softwaretechnisch in weiten Teilen automatisiert werden.

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

AP.1.1: Aufbereitung von Versuchsdaten aus vorhandenen Projekten und Publikationen in einer für KI-unterstützte Materialmodellierung geeigneten Form.

AP 1.2: Aufarbeitung ausgewählter Stoffmodelle für Bentonit und Bereitstellung in einer Open-source-Modellbibliothek

AP1.3: Automatisierung von Verifikations- und Validierungstests sowie formaler Konsistenztests für beliebige Materialmodelle

AP 2: KI-unterstützte Modellauswahl

AP 3: Entwicklung eines KI-Interface in MFront

AP 4: KI-unterstützte Extraktion konstitutiver Zustands- und Einflussgrößen aus Vollfelddaten

AP 5: KI-unterstützte Hybride Stoffmodellierung

AP 6: Koordination und Dokumentation

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Aufgrund seiner besonderen Relevanz für die Anwendung in Verschlussbauwerken fokussiert sich die Arbeit in erster Linie auf das Quellverhalten von Bentonit unter ödometrischen Bedingungen. Zuerst wurde im Rahmen von AP 1.1 eine detaillierte Literaturrecherche durchgeführt und nach Absprache mit den beteiligten Projektpartnern der Bentonit-Typ **MX-80** ausgewählt. Der Grund ist, dass dieser Typ weltweit zum Einsatz kommt und als standardisiertes Material angesehen werden kann. Zudem wurde auch eine Einigung auf die relevanten **Metadaten** (z.B. Wassergehalt, Trockendichte, Größe der Probe, Versuchstemperatur) erzielt. Perspektivisch sollen Daten aus neuesten Veröffentlichungen und aus Datenbanken automatisiert der KI-gestützten Materialmodellierung bereitgestellt werden. Durch die Automatisierung werden potentielle Fehlerquellen minimiert und der Zeitaufwand für die Erstellung KI-konformer Daten reduziert. Zur Datenextraktion wurden zwei Ansätze verfolgt:

- die Digitalisierung von Diagrammen mithilfe von **AUTOMERIS** (<https://automeris.io/>), um Zeitreihen zu extrahieren
- die automatisierte Extraktion relevanter Daten einschließlich der zugehörigen Metadaten mittels **Python (Pandas)**

Durch den hohen Automatisierungsgrad werden potenzielle Fehlerquellen minimiert und der Aufwand für die Aufbereitung **KI-konformer Daten** deutlich reduziert. Die Automatisierung unterstützt dabei drei zentrale Ziele:

Skalierbarkeit der Datennutzung

Durch die Automatisierung können große Datenmengen aus unterschiedlichen Quellen effizient verarbeitet werden. Das ermöglicht es, die KI-Modelle kontinuierlich mit aktuellen und vielfältigen Datensätzen zu versorgen, was deren Generalisierungsfähigkeit verbessert.

Reproduzierbarkeit und Nachvollziehbarkeit

Automatisierte Prozesse sind dokumentierbar und standardisierbar, was die Reproduzierbarkeit der Datenaufbereitung erhöht. Das ist essenziell für die Modellvalidierungen.

Zeitnahe Integration neuer Forschungsergebnisse

Neue Daten aus aktuellen Publikationen oder Datenbanken können schneller in bestehende Modellierungsprozesse integriert werden. Das verkürzt den Innovationszyklus und verbessert die Aktualität der Modelle.

Derzeit konzentriert sich die Datenextraktion insbesondere auf folgende Quelle:

Cabrera, V., López-Vizcaíno, R., Navarro, V., & Yustres, Á. (2023). Database for validation of thermo-hydro-chemo-mechanical behaviour in bentonites. *Environmental Earth Sciences*, 82(9), 207.

4. Geplante Weiterarbeiten

In AP1 konzentrieren sich die weitergehenden Arbeiten auf die Verbesserung der entwickelten Extraktionsverfahren, sowie auf die Implementierung einer ersten automatisierten Prüfung der Daten hinsichtlich ihrer Konsistenz. Es ist geplant, Daten aus den Projekten BEACON und ANCHORS für die Weiterentwicklung der KI-gestützten Materialmodellierung zu verwenden. Das übergeordnete Ziel ist die Entwicklung einer **automatisierten Datenpipeline**.

5. Berichte, Veröffentlichungen

keine

Antragssteller(in) / ausführende Stelle: TU Bergakademie Freiberg, Gustav-Zeuner-Str. 1, 09599 Freiberg, Institut für Geotechnik,		Förderkennzeichen: 02 E 12244B
Vorhaben (Thema/Titel): Verbundprojekt: KI-unterstützte Stoffmodellierung am Beispiel von Bentonit (KI-Stoff), Teilprojekt B		
Themenbereich des Fördervorhabens: C3.1 Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-) biologische (THMCb-) Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung C3.3 Werkzeuge der Sicherheitsanalysen		
Laufzeit des Vorhabens: 01.02.2025 bis 31.01.2028		Berichtszeitraum: 01.02.2025 bis 30.06.2025
Gesamtkosten des Vorhabens: 313.454,00 EUR		Projektleitung: Prof. Dr. Thomas Nagel

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Das übergeordnete Ziel dieses Forschungsprojekts besteht darin, die Lücke zwischen Experiment und Simulation im Kontext Bentonit zu verringern. Um dieses Ziel zu erreichen, soll der Prozess der Stoffmodellauswahl und -anpassung mit Hilfe KI-basierter Methoden unterstützt sowie algorithmisch und softwaretechnisch in weiten Teilen automatisiert werden. Versuchs- und Messdaten, die zur Charakterisierung des Materialverhaltens von Bentonit erhoben werden, sollen gemeinsam mit bereits existierenden Stoffmodellen in einer Modellbibliothek erfasst und quelloffen zugänglich gemacht werden. Anschließend werden KI-unterstützte Algorithmen zur Modellauswahl entwickelt, die für die jeweiligen Daten das optimale Stoffmodell identifizieren, kalibrieren und ggf. erweitern sollen. Die softwaretechnische Umsetzung erfolgt dabei unter Verwendung generischer Schnittstellen, die eine direkte Nutzung der Ergebnisse des Workflows in FEM Simulatoren erlaubt.

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

AP1: Aufbereitung experimenteller Daten und Implementierung bestehender Bentonitmodelle in eine Stoffmodellbibliothek (BGE TEC, TUBAF)

Aufbereitung von Versuchsdaten für die Simulation, Etablierung einer digitalen Stoffmodellbibliothek mit ausgewählten Bentonitmodellen, Integration formaler Modellanforderungen in Testumgebungen für Stoffmodelle.

AP2: KI-unterstützte Modellauswahl (TUBS, TUBAF)

Nutzung von Elementtestdaten für die Auswahl von Stoffmodellen aus einer Modellbibliothek basierend auf einem Vergleich von Simulation und Experiment unter Verwendung geeigneter Algorithmen.

AP3: Entwicklung eines KI-Interface in MFront (TUBAF, BGE TEC)

Erweiterung der MFront Schnittstelle auf eine Verwendung ML-gestützter bzw. hybrider Stoffmodelle.

AP4: KI-unterstützte Extraktion konstitutiver Zustands- und Einflussgrößen aus Vollfelddaten (TUBS, TUBAF, BGE TEC)

Nutzung von Vollfelddaten und voll gekoppelten THM Simulationen zur Parameteridentifikation von Stoffmodellen unter stark gekoppelten transienten Bedingungen.

AP5: KI-unterstützte hybride Stoffmodellierung (TUBS, BGE TEC, TUBAF)

Erweiterung von Stoffmodellen um datengetriebene Korrekturterme (hybride Modelle).

AP6: Koordination und Dokumentation (BGE TEC, TUBAF, TUBS)

Projektmanagement und -koordination, Informationsfluss, Berichtslegung.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1: Es fanden Abstimmungen aller Partner zur Wahl der initialen experimentellen Datensätze statt. Konkret stehen zunächst als Elementversuche ausgewertete Datensätze des MX-80 Bentonits im Vordergrund. Gleichzeitig wurde zur Vorbereitung der Stoffmodellbibliothek mit der Integration unterschiedlicher Stoffmodelle in eine einheitliche softwaretechnische Implementierung begonnen.

AP2: Es wurden erste Rechenfälle für die Anbindung der Parameteridentifikationsroutinen der TUBS an OGS definiert und übergeben. Weitere Informationen siehe ZB TUBS.

AP3: Noch nicht begonnen.

AP4: Noch nicht begonnen.

AP5: Noch nicht begonnen.

AP6: Es fanden zwei durch den Koordinator organisierte Onlinetreffen statt. Zusätzlich kamen die MA der TUBS für mehrere Tage nach Freiberg für eine Einführung in OGS. Dabei standen erste Arbeiten von AP2 im Vordergrund.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP1: Weiterer Aufbau der Stoffmodellbibliothek und der zugehörigen Testinfrastruktur in Verbindung mit den von BGE TEC zusammengetragenen Daten.

Siehe Helfer et al., (2025). The MFrontGallery project. Journal of Open Source Software, 10(109), 7742, <https://doi.org/10.21105/joss.07742>

AP2: Die Arbeiten zur Parameteridentifikation werden fortgeführt und sukzessive um eine Modellselektion erweitert.

5. Berichte, Veröffentlichungen

keine

Antragssteller(in) / ausführende Stelle: TU Braunschweig		Förderkennzeichen: 02 E 12244C
Vorhaben (Thema/Titel): KI-unterstützte Stoffmodellierung am Beispiel von Bentonit (KI-STOFF)		
Themenbereich des Fördervorhabens: C3.1 Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-) biologische (THMCb-)Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung C3.3 Werkzeuge der Sicherheitsanalysen		
Laufzeit des Vorhabens: 01.02.2025 bis 31.01.2028		Berichtszeitraum: 01.02.2025 bis 30.06.2025
Gesamtkosten des Vorhabens: 325.161,00 EUR		Projektleitung: Prof. Dr.-Ing. Henning Wessels

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Ziel des Projekts ist es, mithilfe automatisierter Modellauswahl aus einer umfangreichen Bibliothek geeigneter Stoffmodelle das Verhalten von Bentonit realitätsnah zu beschreiben. Dadurch soll die Diskrepanz zwischen Experiment und Simulation systematisch reduziert werden.

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

AP 1.1: Aufbereitung von Versuchsdaten aus vorhandenen Projekten und Publikationen in einer für KI-unterstützte Materialmodellierung geeigneten Form.

AP 1.2: Aufarbeitung ausgewählter Stoffmodelle für Bentonit und Bereitstellung in einer Open-source-Modellbibliothek

AP 1.3: Automatisierung von Verifikations- und Validierungstests sowie formaler Konsistenztests für beliebige Materialmodelle

AP 2: KI-unterstützte Modellauswahl

AP 3: Entwicklung eines KI-Interface in MFront

AP 4: KI-unterstützte Extraktion konstitutiver Zustands- und Einflussgrößen aus Vollfelddaten

AP 5: KI-unterstützte Hybride Stoffmodellierung

AP 6: Koordination und Dokumentation

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Ausgehend von einem bereits etablierten, KI-gestützten Modellselektionsprozess für hyperelastische Materialien (z. B. Treloar-Daten) wurde dieser Ansatz auf das Barcelona Basic Model zur Beschreibung des Bentonitverhaltens übertragen. Im Gegensatz zum hyperelastischen Fall, der mit experimentellen Daten getestet wurde, erfolgte hier die Kalibrierung anhand synthetischer Daten. Für das Barcelona Basic Model wurde eine manuelle Implementierung erstellt, um das Modellverhalten zu verstehen und Sensitivitätsanalysen (Sobol-Indizes) durchzuführen. Zudem wurde eine automatisierte Kalibrierungs- und Modellselektionsroutine auf Basis von Sparse Regression (LASSO, Flaschel et al., 2023) entwickelt.

4. Geplante Weiterarbeiten

Im nächsten Schritt soll das Modellierungskonzept in OpenGeoSys (OGS) integriert werden, um reale Datensätze (bereitgestellt durch die BGE) zu analysieren. Hierzu wird OGS unter macOS ausgeführt, um modellinterne Parameter zu extrahieren. Anschließend erfolgt die Durchführung synthetischer Kalibrierungstests sowie Sensitivitätsanalysen, gefolgt von der Anwendung auf reale Versuchsdaten. Ziel ist der Aufbau einer modellbasierten Bibliothek, aus der automatisch geeignete Modelle mittels Sparse Regression ausgewählt werden können (Flaschel et al., 2023).

Antragssteller(in) / ausführende Stelle: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 12254
Vorhaben (Thema/Titel): Methodisches Vorgehen zur Entwicklung und Validierung von Modellen zur langzeitsicherheitlichen Bewertung von Endlagern für radioaktive Abfälle (DOSIS)		
Themenbereich des Fördervorhabens: C3.2: Methodische Grundlagen der Nachweisführung C3.3: Werkzeuge der Sicherheitsanalysen		
Laufzeit des Vorhabens: 01.12.2024 bis 30.11.2027		Berichtszeitraum: 01.01.2025 bis 30.06.2025
Gesamtkosten des Vorhabens: 1.070.855,00 EUR		Projektleitung: 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

Im Berichtszeitraum lag der Fokus auf konzeptionellen Arbeiten zu den geplanten Erweiterungen von NaTREND. Insbesondere wurden Aspekte zur Modellierung der Gebirgskonvergenz diskutiert und erste Ansätze zur Integration in das bestehende Rechenmodul bewertet.

Zur Erweiterung des Kenntnisstands auf dem Gebiet der Strömungs- und Transportprozesse in porösen Medien wurde an der internationalen Konferenz InterPore 2025 (19.-22. Mai in Albuquerque, USA) teilgenommen. Auf der Konferenz wurde der aktuelle Stand von RepoTREND vorgestellt. Durch die Teilnahme an der internationalen Fachkonferenz erfolgte ein fachlicher Austausch zu aktuellen Entwicklungen im Bereich der porösen Medien, insbesondere hinsichtlich gekoppelter Prozesse und deren numerischer Umsetzung. Die dort gewonnenen Impulse fließen in die weitere Konzeptentwicklung ein.

AP3

Die interne Projektstruktur wurde weiter gefestigt. Hierzu gehörten unter anderem die Abstimmung zu Schnittstellen zwischen den geplanten Modellkomponenten sowie die Aktualisierung der technischen Dokumentation und des Aufgabenplans im Projektteam.

Der vorliegende Bericht wurde erstellt.

4. Geplante Weiterarbeiten

Im nächsten Halbjahr soll die konzeptionelle Vorarbeit zu den modellierten Prozessen fortgeführt und konkretisiert werden. Im Fokus stehen dabei die mathematische Formulierung und die numerische Umsetzung der Gebirgskonvergenz.

Aufbauend auf den diskutierten Ansätzen werden erste Modellkomponenten spezifiziert und Anforderungen an die Implementierung erarbeitet. Darüber hinaus ist geplant, erste Testszenarien für die spätere Validierung vorzubereiten.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Reiche, T., Becker, A.-D., Lauke, T., Wolf, J.W.: RepoTREND - A Simulation Tool for Safety Analysis of Final Repository for Radioactive Waste, 19.-22. Mai, 2025, Albuquerque (USA).

2.2 Vorhaben Bereich D1 – D3

Antragssteller(in) / ausführende Stelle: Freie Universität Berlin, FB Politik und Sozialwissenschaften		Förderkennzeichen: 02 E 11849C
Vorhaben (Thema/Titel): Verbundvorhaben: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland – TRANSENS, Teilprojekt C		
Themenbereich des Fördervorhabens: D2.1 Long-Term Governance		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2019 bis 31.03.2025		Berichtszeitraum: 01.01.2025 bis 31.03.2025
Gesamtkosten des Vorhabens: 991.894,00 EUR		Projektleitung: 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 (Sammelband), 4 Fachveröffentlichungen (3x in wissenschaftlichen Zeitschriften / 1x in Sammelband)
- Zuarbeit zum TRANSENS-Abschlussbericht und Kommentierung
- Bilanzierung / Kommentierung der Zwischen- und Endlagerung nach den Verzögerungen, die prognostiziert wurden. Verfassen eines Fachbeitrags, eingereicht bei den Blättern für deutsche und internationale Politik
- Wiedereinreichung: Überarbeitung des Beitrags von Albert Denk und Achim Brunnengräber: Post-Nuclear Dependencies - How Germany's Cooperation with Russia's Rosatom Counteracts Peace Efforts nach Review (für die Zeitschrift: Renewable and Sustainable Energy Reviews)

DIPRO:

- Fertigstellung und Veröffentlichung des Beitrags zum Thema „Die Beschleunigungsdebatte im Standortauswahlverfahren“ für das Forschungsjournal Soziale Bewegungen
- Zuarbeit zum TRANSENS-Arbeitsbericht „Ein Querschnitt durch die Forschung des transdisziplinären Arbeitspakets DIPRO“

BegleitTeam.TD:

- Zuarbeit / Kommentierung des TRANSENS-Arbeitsberichtes „Formative Transdisziplinaritäts-Forschung. Die Begleitforschung zur transdisziplinären Forschung in TRANSENS“

4. Geplante Weiterarbeiten

- Fortsetzung der Betreuung der Dissertation von Dörte Themann

5. Berichte, Veröffentlichungen, Vorträge

VERÖFFENTLICHUNGEN:

- Brunnengräber, Achim (2025): Beschleunigung *durch* oder *auf* Kosten der Öffentlichkeitsbeteiligung? Das Verfahren zur Standortauswahl für ein geologisches Tiefenlager für hochradioaktive Abfälle soll beschleunigt werden. Nicht alle dafür vorgetragenen Gründe können überzeugen, in: Forschungsjournal Soziale Bewegungen, FJSB-Plus 2025/5, <https://forschungsjournal.de/fjsb-plus/brunnengraeber-beschleunigung-durch-oder-auf-kosten-der-oeffentlichkeitsbeteiligung/>
- Smeddinck, Ulrich; Sierra, Rosa; Schwarz, Lucas (2025): Kooperative Gerechtigkeit – blühende Landschaft? Die Standortvereinbarung nach § 10 Abs. 4 S. 3 Standortauswahlgesetz: Interdisziplinäre Beiträge, <https://biblioscout.net/content/10.35998/9783830556312.pdf>
- Darin: Schwarz, Lucas (2025): Eine raumverträgliche Potenzialanalyse als Grundlage für kompensatorische Gerechtigkeit. Der goldene Mix aus Ökonomie, Ökologie und Sozialem, 107-124, <https://biblioscout.net/content/10.35998/9783830556312.pdf>
- Brunnengräber, Achim (2025): Der nukleare Dreck muss weg. Aber er bleibt für immer in der Welt, in: Blätter für deutsche und internationale Politik (in Review)
- Denk, Albert; Brunnengräber, Achim (2025): Post-Nuclear Dependencies - How Germany's Cooperation with Russia's Rosatom Counteracts Peace Efforts, in: Renewable and Sustainable Energy Reviews (im Review / Wiedereinreichung)

Antragssteller(in) / ausführende Stelle: Karlsruher Institut für Technologie (Großforschungsaufgabe)		Förderkennzeichen: 02 E 11849D
Vorhaben (Thema/Titel): Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt D		
Themenbereich des Fördervorhabens: D2.1 Long-Term Governance		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2019 bis 31.03.2025		Berichtszeitraum: 01.01.2025 bis 31.03.2025
Gesamtkosten des Vorhabens: 550.967,50 EUR		Projektleitung: 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

Die Schwerpunkte der Arbeiten des KIT-INE (F. Becker und V. Metz) liegen im Modul „Pfadabhängigkeit als Risiko und Herausforderung“ des TAP „HANDlungsfähigkeit und Flexibilität in einem reversiblen Verfahren“ (HAFF). Im ersten Halbjahr 2025 waren F. Becker und V. Metz bei der Erstellung des TRANSENS Berichtes „Aspekte im Hinblick auf eine Neugenehmigung von Zwischenlagern für hochradioaktive Abfälle und abgebrannte Brennelemente nach 40 Jahren Betriebslizenz“ und des TRANSENS-Abschlussberichtes „Fünf Jahre transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland“ beteiligt.

Gemeinsam mit Kolleginnen und Kollegen der TRANSENS-Projektpartner des KIT-ITAS und der TU Berlin organisierten F. Becker und V. Metz am 7. Februar 2025 ein interdisziplinäres Seminar mit Exkursion. Studierende des Seminars zur „Wirtschafts- und Infrastrukturpolitik“ (WIP) kamen zusammen mit Prof. Dr. Christian von Hirschhausen und Dr. Fabian Präger von der Fakultät für Wirtschaft und Management der TU Berlin zum KIT-INE. Im Anschluss an eine Besichtigung des KIT-INE-Kontrollbereichs und einer Ausstellung zu Radioaktivität im Fortbildungszentrum für Technik und Umwelt des KIT diskutierten die Studierenden der TU Berlin mit Mitarbeitern des INE über ihre Seminararbeiten zu ökonomischen Themen, wie Longterm-Governance in Finnland, Ungewissheiten einer langfristigen / fondgebundenen Finanzierung der Entsorgung hoch radioaktiver Abfälle.

F. Becker und V. Metz sind Mitverfasser des Beitrags „40 plus X years interim storage of high active waste“ (Julia M. Neles, Frank Becker, Thomas Hassel, Thorsten Leusmann, Volker Metz, Isabelle Scharf) für die safeND2025, dem Forschungssymposium des BASE. Dieser Beitrag wurde im Juni 2025 vom Veranstaltungskomitee des safeND2025 für eine Präsentation ausgewählt.

4. Geplante Weiterarbeiten

Das Forschungsprojekt TRANSENS ist am 31. März 2025 zu Ende gegangen. Zusammen mit Julia M. Neles will Frank Becker auf der safeND2025 Konferenz in Berlin, dem Forschungssymposium des BASE, vom 17. bis 19. September 2025 die Ergebnisse des gemeinsamen TRANSENS-Berichts vorstellen.

5. Berichte, Veröffentlichungen

- Neles, J., Becker, F., Hassel, T., Leusmann, T., Metz, V., Scharf, I., 2025. Aspekte im Hinblick auf eine Neugenehmigung von Zwischenlagern für hochradioaktive Abfälle und abgebrannte Brennelemente nach 40 Jahren Betriebslizenz, TRANSENS-Bericht. TU Clausthal, Clausthal-Zellerfeld. <https://doi.org/10.21268/20241213-0>
- TRANSENS, 2025. Verbundvorhaben TRANSENS: Abschlussbericht: Fünf Jahre transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland, TRANSENS-Bericht. TU Clausthal, Clausthal-Zellerfeld. <https://doi.org/10.21268/20250227-0>

Antragssteller(in) / ausführende Stelle: Karlsruher Institut für Technologie (Großforschungsaufgabe)		Förderkennzeichen: 02 E 11849E
Vorhaben (Thema/Titel): Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt E		
Themenbereich des Fördervorhabens: D2.1 Long-Term Governance D2.3 Multi-kriterielle Entscheidungsprozesse		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2019 bis 31.03.2025		Berichtszeitraum: 01.01.2025 bis 31.03.2025
Gesamtkosten des Vorhabens: 2.720.831,00 EUR		Projektleitung: 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 Arbeiten sind abgeschlossen.

TAP DIPRO:

Es wurde der Bericht zum DIPRO-Workshop D „(Finanzieller) Ausgleich für ein Endlager“ abgeschlossen und veröffentlicht.

Außerdem wurde der Bericht zum Workshop F/Abschlussbericht fertiggestellt und der Review durchgeführt.

Ferner wurde die Gesamtdati für den Kommentar zum Standortauswahlgesetz, 2. Auflage, fertiggestellt und erstmals an den Verlag gesendet. Im Anschluss wurden Hinweise des Verlages zur Vereinheitlichung von Formalia und Struktur umgesetzt. Die überarbeitete Datei ist dann erneut an den Verlag gesendet worden.

Aus beiden Teams heraus wurde noch ein Sammelband-Beitrag zum lernenden Standortauswahlverfahren für ein Endlager verfasst und an die Herausgeber versendet.

4. Geplante Weiterarbeiten

TAP HAFF: --

TAP DIPRO:

Die Druckfahnen zum Kommentar werden von den Autor:innen nach Eintreffen vom Verlag durchgesehen und soweit notwendig in geringfügigem Umfang korrigiert. Für den DIPRO-Bericht F/Abschlussbericht müssen letzte Überarbeitungen nach Review gemacht und von der Reviewerin befürwortet werden, ehe die Veröffentlichung erfolgen kann.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Scharpf, Lucia; Thomas Hassel; Rosa Sierra: (Finanzieller) Ausgleich für die Ansiedlung eines Endlagers? Dokumentation des DIPRO-Workshops am 7. und 8. Mai 2022 in Karlsruhe. TRANSENS-Bericht Nr. 31, Karlsruhe, Hannover, Kiel 2025.

Smeddinck, Ulrich: Die Standortvereinbarung: Raumentwicklung, kooperative Gerechtigkeit und Emotionen – Die singuläre Infrastruktur eines Endlagers für hochradioaktive Abfälle als Anlass für Kompensationen, in: Ulrich Smeddinck, Rosa Sierra, Lucas Schwarz (Hg.), Kooperative Gerechtigkeit – blühende Landschaft? Die Standortvereinbarung nach § 10 Abs. 4 S. 3 Standortauswahlgesetz – Interdisziplinäre Beiträge, Stuttgart 2025, S. 19 - 51

Smeddinck, Ulrich; Rosa Sierra, Lucas Schwarz (Hg.): Kooperative Gerechtigkeit – blühende Landschaft? Die Standortvereinbarung nach § 10 Abs. 4 S. 3 Standortauswahlgesetz – Interdisziplinäre Beiträge, Stuttgart 2025

Smeddinck, Ulrich; Rosa Sierra, Lucas Schwarz: Kooperative Gerechtigkeit – blühende Landschaft? Die Standortvereinbarung nach § 10 Abs. 4 S. 3 Standortauswahlgesetz: zur Einführung, in: Ulrich Smeddinck, Rosa Sierra, Lucas Schwarz (Hg.), Kooperative Gerechtigkeit – blühende Landschaft? Die Standortvereinbarung nach § 10 Abs. 4 S. 3 Standortauswahlgesetz – Interdisziplinäre Beiträge, Stuttgart 2024, S. 9 - 17

Antragssteller(in) / ausführende Stelle: 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		
Themenbereich des Fördervorhabens: C2.3 Geotechnische und technische Barrieren C3.1 Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-) Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung D2.1 Long-Term Governance		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2019 bis 31.03.2025		Berichtszeitraum: 01.01.2025 bis 31.03.2025
Gesamtkosten des Vorhabens: 505.379,00 EUR		Projektleitung:in: Julia Neles

1. Vorhabenziele / Bezug zu anderen Vorhaben

In TRANSENS wurde transdisziplinär geforscht: Die interessierte Öffentlichkeit wird planvoll in Forschungskontexte, konkret in vier Transdisziplinäre Arbeitspakete (TAP) eingebunden. Die Möglichkeiten transdisziplinärer Forschung in der nuklearen Entsorgung wurden im Verbund systematisch reflektiert (Transdisziplinaritätsforschung). Weitere Aktivitäten zielten auf Nachwuchsförderung und Kompetenzerhalt. Die Expertise des Öko-Instituts wurde insbesondere in die TAPs HAFF und SAFE einbezogen.

Das TAP HAFF fokussierte 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 vorsah. Das TAP SAFE fokussierte 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 gliederte sich in drei Module, an allen drei war das Öko-Institut beteiligt, wobei Modul 2 vom Öko-Institut verantwortet wurde, und beinhaltete u.a. folgende Arbeitsschritte:

a) Literaturrecherche, b) Experten-Interviews zu Raumwirkungen von kerntechnischen Entsorgungsanlagen, c) Transdisziplinärer Workshop mit Praxisakteuren zum Umgang mit räumlichen Transformationen sowie leitfadengestützte Interviews zu räumlicher Identität und Entwicklung eines raumsensiblen Longterm Governance-Konzeptes, d) Visuelles Experiment zur Wirkung von räumlichen Transformationen (Landschaftswandel) mit Praxisakteuren, e) Fokusgruppe mit Stakeholdern zur Prüfung und Weiterentwicklung der konzeptionellen Ideen, f) Analyse der Interviews zur Entwicklung partizipativer Ausgestaltungsempfehlungen; Erfahrungen aus dem Schweizer Fall, g) Synthese der Ergebnisse und Entwicklung von Handlungsempfehlungen zum Umgang mit raumzeitlichen Spezifika unter Berücksichtigung von Haltepunkten und Rücksprüngen.

TAP SAFE: Stakeholder-Perspektiven und Transdisziplinarität

Das TAP gliederte sich in sieben Module, an vier Modulen ist das Öko-Institut beteiligt. Das Öko-Institut unterstützte mit eigenen Arbeiten den Diskurs.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Das Öko-Institut nutzte die Verlängerung des Vorhabens um 6 Monate. Zum 31.03.2025 wurde das Vorhaben abgeschlossen.

TAP HAFF: Modul 1: Im Januar 2025 wurde der TRANSENS-Bericht Nr. 25, „Aspekte im Hinblick auf eine Neugenehmigung von Zwischenlagern für hochradioaktive Abfälle und abgebrannte Brennelemente nach 40 Jahren Betriebszeit“ veröffentlicht.

Modul 2: Im März 2025 wurde der TRANSENS-Bericht Nr. 29, „Der Aspekte einer raumsensiblen Long-term Governance der Endlagerung, Die Bedeutung von räumlicher Identität und deren Integration in Entscheidungshandeln“ abgeschlossen.

Im Gesamtvorhaben wurde als TRANSENS-Bericht Nr. 33 der Abschlussbericht unter Beteiligung des Öko-Instituts vorgelegt.

4. Geplante Weiterarbeiten

Alle Arbeiten sind abgeschlossen.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Mbah, M.; Kelly, R.; Kuppler, S.; Leusmann, T.; Brohmann, B. (2025): Aspekte einer raumsensiblen Long-term Governance der Endlagerung. Freiburg TRANSENS-Bericht-29

Mbah, M. (2025): Entsorgung von Atom Müll: Partizipation anhand der Ortsverbundenheit individuell gestalten. Blog-Beitrag. Öko-Institut. <https://www.oeko.de/blog/entsorgung-von-atommuell-partizipation-anhand-der-ortsverbundenheit-individuell-gestalten/>

Neles, J., Becker, F., Hassel, T., Leusmann, T., Metz, V., Scharf, I. (2025): 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

Antragssteller(in) / ausführende Stelle: Universität Kassel, Arbeits- und Organisationspsychologie		Förderkennzeichen: 02 E 11849J
Vorhaben (Thema/Titel): Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt J		
Themenbereich des Fördervorhabens: 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: 01.01.2025 bis 31.03.2025
Gesamtkosten des Vorhabens: 327.569,00 EUR		Projektleitung: 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 eines linearen Ablaufs des Verfahrens erarbeitet werden durch ein schrittweises Vorgehen, mit Haltepunkten im Verfahrensablauf, der Option von begründeten Rückschritten und Reaktion auf neue Forschungsergebnisse.

Im TAP SAFE wird untersucht, ob und inwieweit Sichtweisen von Nicht-Spezialisten nahelegen, das Konzept des Safety Case anzupassen oder weiterzuentwickeln, um so die Diskurs- und Beratungsfähigkeit zu verbessern. Weiterhin wird untersucht, ob und inwieweit Sichtweisen von Nicht-Spezialisten nahelegen, das Konzept des Safety Case anzupassen oder weiterzuentwickeln, um so die Diskurs- und Beratungsfähigkeit zu verbessern.

2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

Das Fachgebiet Arbeits- und Organisationspsychologie beteiligt sich insbesondere am TAP HAFF und TAP SAFE mit folgenden Arbeitspaketen:

- HAFF AP 1: Psychologische Aspekte bei der Entscheidungsfindung für Haltepunkte und Rückschritte.
- HAFF AP 2: Unterstützung des schrittweisen Verfahrens hinsichtlich einer positiven Sicherheits- und Fehlerkultur.
- HAFF AP 3: Anwendung der Methodik auf Szenarien.

sowie

- SAFE AP 1: Bestandsaufnahme ganzheitlicher, systemischer Effekte der menschlichen Zuverlässigkeit auf den Umgang mit Sicherheitsanforderungen.
- SAFE AP 2: Methode zur Berücksichtigung der Aspekte der menschlichen Zuverlässigkeit in den Einschätzungen und Bewertungen von Ungewissheiten.
- SAFE AP 3: Anwendung der Methodik auf Modellrechnungen und Ergebnisdiskussionen.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

HAFF AP 1-3 und SAFE AP 1-3: Zusammenfassende Darstellung der Methodik zur Bewertung des Einflusses menschlicher Zuverlässigkeit und Diskussion hinsichtlich der Steigerung menschlicher Zuverlässigkeit (Fritsch et al., 2025).

HAFF AP 1-3 und SAFE AP 1-3: TRANSENS Ringvorlesung (TAP EDU) zur Phänomenologie von Projekten der Endlagerung sowie zur Bewertung der menschlichen Zuverlässigkeit im laufenden Verfahren mit Einbindung der durchführenden Akteure aller Arbeitsebenen.

SAFE AP 1-3: Darstellung der methodischen Bewertung zum Umgang mit Ungewissheiten im Kontext von Modellrechnungen und Aufbau von Vertrauen von Nicht-Spezialisten im laufenden Verfahren (Sträter & Fritsch, in review).

SAFE AP 3: Beiträge zur methodischen Weiterentwicklung der Bewertungsverfahren im Kontext menschlicher Zuverlässigkeit sowie deren Abbildung in Richtlinien des VDI (Sträter, 2025).

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 zur Diskussion auf dem Forschungssymposium safeND 2025 des BASE.

HAFF AP1 und SAFE AP 3: Erstellung eines Beitrags zur übergeordneten Bewertung psychologischer Aspekte der Entscheidungsfindung mit Anwendung auf Fragestellungen der Endlagerungen in der 2. Auflage des Handbuchs Handbook of Advanced Performability Engineering, Springer Verlag.

5. Berichte, Veröffentlichungen

- Fritsch, F. (2025). Selbstbewertung als Methode zur Steigerung der menschlichen Zuverlässigkeit: Eine methodische Ergänzung der HRA-Verfahrenslandschaft. In VDI-Wissensforum (Hrsg.), 32. VDI-Fachtagung Entwicklung und Betrieb zuverlässiger Produkte, VDI-Berichte 2448, S. 71-82. Düsseldorf: VDI-Verlag.
- Fritsch, F., Schmaus, C., Stange, J. & Sträter, O. (2025). Menschenzentrierte Gestaltung menschlicher Zuverlässigkeit am Beispiel der Endlagersuche. In GfA (Hrsg.), Arbeit 5.0: Menschzentrierte Innovationen für die Zukunft der Arbeit (S. 987-992). Sankt Augustin: GfA Press.
- Sträter, O. (2025). Erfordernisse an die menschliche Zuverlässigkeit und deren Abbildung in VDI Richtlinien und Expertenempfehlungen. In VDI-Wissensforum (Hrsg.), 32. VDI-Fachtagung Entwicklung und Betrieb zuverlässiger Produkte, VDI-Berichte 2448, S. 97-110. Düsseldorf: VDI-Verlag.
- Straeter, O. and Fritsch, F.: How to handle uncertainties in modelling due to human reliability issues for nuclear disposals, Saf. Nucl. Waste Disposal Discuss. [preprint], <https://doi.org/10.5194/sand-2025-3>, in review, 2025.
- [Straeter, O., Seidel, L., Schmidt, N. & Fritsch, F. \(2025\) Managementsysteme im Sinne des StandAG gestalten. SafeND. Berlin](#)

Antragssteller(in) / ausführende Stelle: Karlsruher Institut für Technologie (Großforschungsaufgabe) Institut für Technikfolgenabschätzung und Systemanalyse		Förderkennzeichen: 02 E 12204
Vorhaben (Thema/Titel): Formen der Konfliktbearbeitung in der nuklearen Entsorgung (KonE)		
Themenbereich des Fördervorhabens: D2.2 Sicherheitskultur und Mechanismen der Fehlerkorrektur im selbst hinterfragenden System		
Laufzeit des Vorhabens: 01.11.2024 bis 31.10.2027		Berichtszeitraum: 01.01.2025 bis 30.06.2025
Gesamtkosten des Vorhabens: 781.239,00 EUR		Projektleitung: Stefanie Enderle (kommissarisch für 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

Im März 2025 fand das Kick-off-Meeting mit den Projektpartner:innen statt. Im Mittelpunkt stand die gemeinsame Erarbeitung von Merkmalen und Annäherungen an den Begriff „soziotechnischer Konflikt“ im Kontext der Endlagerung. Dabei wurden verschiedene disziplinäre Perspektiven zusammengeführt. Ziel war es, eine konzeptionelle Schärfung des Begriffs vorzunehmen, wobei sowohl theoretische Ansätze aus der Literatur als auch erste empirische Beobachtungen einbezogen wurden. Für den weiteren Forschungsverlauf wurde eine heuristisch-iterative Vorgehensweise festgelegt, um flexibel auf die Dynamiken im Forschungsfeld reagieren zu können.

Zur Koordination des weiteren Projektverlaufs wurden vierteljährliche Online-Treffen mit den Projektpartner:innen vereinbart.

Ein aktuell besonders virulenter Konfliktgegenstand ist das Spannungsfeld von Zeit und Beschleunigung im Endlagerdiskurs. Hierzu wurde ein Beitrag unter dem Titel „Analyzing socio-technical conflicts: characteristics, dimensions and their potential for nuclear waste governance“ zur internationalen Konferenz safeND eingereicht und angenommen (Konferenztermin: September 2025).

Aufgrund einer veränderten Personalsituation wurde die Zusammenarbeit mit den Partner:innen Christiane Schürkmann (Universität Mainz) und Rony Emmenegger (Universität Fribourg, CH) intensiviert. Die Vorbereitung einer wissenschaftlichen Veröffentlichung zum konzeptionellen Verständnis soziotechnischer Konflikte wurde im Berichtszeitraum aufgenommen.

4. Geplante Weiterarbeiten

Im Anschluss an die konzeptionellen Vorarbeiten wird im Arbeitspaket 1 weiterhin das theoretische Verständnis soziotechnischer Konflikte vertieft, insbesondere mit Blick auf Konfliktodynamiken im Kontext der Beschleunigungsdebatte. Die Ergebnisse dieser Arbeiten sollen in eine wissenschaftliche Veröffentlichung einfließen, die gemeinsam mit den Projektpartner:innen Christiane Schürkmann (Universität Mainz) und Rony Emmenegger (Universität Fribourg, CH) erarbeitet wird.

Diese Ergebnisse bilden die Grundlage für die weiteren empirischen Arbeiten in den Arbeitspaketen 2 bis 4. Im Arbeitspaket 2 beginnt die empirische Datenerhebung. Geplant sind zunächst Dokumentenanalysen. Diese werden im weiteren Projektverlauf durch leitfadengestützte Interviews mit relevanten Akteuren im Konfliktfeld der nuklearen Entsorgung ergänzt.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Im Berichtszeitraum wurde ein Konferenzbeitrag für das interdisziplinäre Forschungssymposium zur Sicherheit nuklearer Entsorgungspraktiken (safeND 2025) angenommen:

Enderle, S., Bechthold, E., and Kuppler, S.: Analyzing socio-technical conflicts: characteristics, dimensions and their potential for nuclear waste governance, Third interdisciplinary research symposium on the safety of nuclear disposal practices, Berlin, Germany, 17–19 Sep 2025, safeND2025-145, <https://doi.org/10.5194/safend2025-145>, 2025.

Antragssteller(in) / ausführende Stelle: Forschungszentrum Jülich GmbH, 52425 Jülich		Förderkennzeichen: 02 W 6279
Vorhaben (Thema/Titel): Neu- und Weiterentwicklung von Konzepten, Methoden und Techniken für die internationale Kernmaterialüberwachung, insbesondere im Rahmen der nuklearen Entsorgung (SAFEGUARDS-3)		
Themenbereich des Fördervorhabens: D3.1 Konzepte zur Kernmaterialüberwachung		
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2019 bis 31.07.2025		Berichtszeitraum: 01.01.2025 bis 30.06.2025
Gesamtkosten des Vorhabens: 889.554,00 EUR		Projektleitung: Dr. Irmgard Niemeyer

1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Die Bundesregierung soll in ihren Bemühungen unterstützt werden, in Zusammenarbeit mit der IAEA 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 IAEA 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 IAEA 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: Keine
- 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; Promotionsprojekt zur Weiterentwicklung von Analyseverfahren von Myonentomographie-Daten
- AP 6.2.3: Keine
- 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'; Unterstützung der Vorbereitungen der ESARDA Jahrestagung (Antwerpen, Mai 2025) und der INMM-Jahrestagung (Washington D.C., August 2025)

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 der INMM-Jahrestagung (Washington D.C., August 2025)

5. Berichte, Veröffentlichungen

- Kreutle, M., Niemeyer, I. (2025): The (Social) Construction of Digital Twins for Safeguards in Nuclear Waste Management: A Stakeholder Analysis as a basis for prototype development. Proc. AMC Conference 2025
- Andreetto, P. et al (2025): Results on re-verification tests of spent fuel casks with muon tomography. MUTOMCA Project. Journal of Applied Physics, in print.

Antragssteller(in) / ausführende Stelle: RWTH Aachen		Förderkennzeichen: 02 W 6281
Vorhaben (Thema/Titel): Antineutrino-Detektion zur Überwachung radioaktiver Abfälle (NU-SAFEGUARDS)		
Themenbereich des Fördervorhabens: D3.1 Kernmaterialüberwachung (Safeguards), Felder D3.1 und D3.2		
Laufzeit des Vorhabens: 01.05.2022 bis 30.11.2025		Berichtszeitraum: 01.01.2025 bis 30.06.2025
Gesamtkosten des Vorhabens: 344.338,00 EUR		Projektleitung: 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 wurden in Zusammenarbeit mit den FZ Jülich weiterbearbeitet, basierend auf den bisherigen Vorarbeiten im Projekt.

Im Rahmen von AP5 wurden die zuvor beschriebenen Einsatzszenarien (Endlager, Zwischenlager) in Unterszenarien aufgeteilt mit spezifischen Operationsphasen, in denen die Abzweigung von Spaltmaterial möglich ist.

Im Bereich Zwischenlager wurden hier die folgenden Phasen identifiziert: I. Transport der radioaktiven Abfälle, II. Annahme der Abfälle im Zwischenlager, III. Wartung/Kontrolle im Zwischenlager, IV. Lagerbereich des Zwischenlagers, V. Transport zur Endlagerung. Bei der Abzweigung wurden jeweils folgende Szenarien betrachtet: a) Entwendung eines Behälters, b) Austausch eines Behälters, c) Öffnung und Materialentnahme und d) Wiederaufarbeitung des Kernmaterials. Im Bereich Endlagen wurden vergleichbare Phasen identifiziert: I.-IV. Schritte vor der Einlagerung, V.-VII. Einlagerungsphase und VII. Endlager nach Verschluss. Hier wurden, analog zum Zwischenlager, die Abzweigungsszenarien a)-d) betrachtet.

Im Rahmen von AP6 werden aktuell die technischen Details aus AP4 auf die AP5 Einsatzszenarien angewandt, um die Nutzbarkeit in jeder Phase auszuwerten und Vor- und Nachteile im Vergleich zu bestehenden Safeguardstechniken zu bewerten. Diese Arbeiten werden mit dem finalen Bericht des FZ Jülichs genutzt, um den Abschlussbericht auszuarbeiten. Vorläufige Erkenntnisse liegen bereits vor und sehen den größten Nutzen für eine Antineutrino-Überwachung in zwei Bereichen:

- 1) Als komplementäre, sekundäre Sicherheitsüberwachung während der statischen Lagerungsphase von Zwischenlagern.
- 2) Zur Überwachung von Behältern in Endlagern nach der Platzierung eines Behälters während des fortlaufenden Betriebs eines Endlagers (abhängig von der verfügbaren Infrastruktur im Endlager).

Da Ergebnisse von AP4 abhängig von bisher nicht bekannten Materialeigenschaften sind – gelöst durch eine parametrische Analyse von Detektorsensitivitäten – werden im Rahmen des Projekts als ergänzende Arbeit zu AP4 auch ein Konzept zur Messung der Eigenschaften von TMS als Antineutrino-Detektionsmedium ausgearbeitet. Diese Messungen werden nicht im Rahmen des Projekts durchgeführt, aber die konzeptuelle Planung vereinfacht eventuelle Anschlussarbeiten.

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, Vortragsabschnitt im Rahmen von “nuSENTRY: antineutrino monitoring for future advanced reactors”. Vortrag bei der DPG Frühjahrstagung 2025 (Bonn, 14.03.2025).

Berichte & Studienarbeiten:

Keine

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 BMUKN-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 | 📖 39 |
| 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 | 📖 66 |
| 02 E 12133A | Verbundprojekt: Weiterführung der Entwicklung von Ausbau von Grubenbauen für ein HAW-Endlager in Tongestein (AGEnT002), Teilprojekt A | 📖 101 |
| 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 | 📖 113 |
| 02 E 12234B | Verbundprojekt: Bewertung der Integrität von Endlagerbehältern unter Korrosionseinfluss im Kristallingestein (BEnKo), Teilprojekt B | 📖 143 |
| 02 E 12244A | Verbundprojekt: KI-unterstützte Stoffmodellierung am Beispiel von Bentonit (KI-Stoff), Teilprojekt A | 📖 145 |

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 | 📖 103 |
|--------------------|---|-------|

Forschungszentrum Jülich GmbH, Wilhelm-Johnen-Straße, 52428 Jülich

- | | | |
|--------------------|---|-------|
| 02 E 12224D | Verbundprojekt: Rückhaltung und Löslichkeit dosisrelevanter Radionuklide unter den reduzierenden Nahfeldbedingungen eines Endlagers im Ton- oder Kristallingestein (RULET), Teilprojekt D | 📖 139 |
| 02 W 6279 | Neu- und Weiterentwicklung von Konzepten, Methoden und Techniken für die internationale Kernmaterialüberwachung, insbesondere im Rahmen der nuklearen Entsorgung (SAFEGUARDS-3) | 📖 166 |

Freie Universität Berlin, Kaiserwerther Str. 16-18, 14195 Berlin

02 E 11849C	Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt C	 154
--------------------	--	---

Friedrich-Schiller-Universität Jena, Fürstengraben 1, 07743 Jena

02 E 12153A	Verbundprojekt: Erosion von Bentonit unter In-situ Bedingungen durch Einwirkung natürlicher Wässer in geologischen Tiefenlagern (EVIDENT), Teilprojekt A	 107
--------------------	--	---

Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Schwertnergasse 1, 50667 Köln

02 E 11829	Tonsteinforschung im Felslabor Mont Terri (MonTe)	 15
02 E 11870A	Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt A	 25
02 E 11880	Sicherheitsrelevante Untersuchungen zur Bentonitaufsättigung (SIRUB)	 37
02 E 11981A	Verbundprojekt: Implementierung eines Monitoringsystems zur Evaluierung der Korrosionsvorgänge an Behältermaterialien in Bentonit-basierten Endlagerkonzepten (IMKORB), Teilprojekt A	 45
02 E 12012A	Verbundprojekt: Weiterentwicklung von d ³ f ⁺⁺ : Hydrogeologische Modellierung im regionalen Maßstab (HYMNE II), Teilprojekt A	 55
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	 62
02 E 12032	Methoden zur experimentellen und numerischen Analyse der geologischen Barriere eines Endlagers in tonreichen Sedimentgesteinsformationen (MAGNUS)	 64
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	 68
02 E 12052B	Verbundprojekt: Konkurrenz und Reversibilität bei Sorptionsvorgängen (KuRSiv), Teilprojekt B	 72
02 E 12122A	Verbundprojekt: Stabilität von Mineralphasen des Eisens im Nahfeld eines Endlagers (STAMINA), Teilprojekt A	 97

02 E 12153C	Verbundprojekt: Erosion von Bentonit unter In-situ Bedingungen durch Einwirkung natürlicher Wässer in geologischen Tiefenlagern (EVIDENT), Teilprojekt C	 111
02 E 12163B	Verbundprojekt: Vertikales hydraulisches Dichtsystem nach dem Sandwich-Prinzip - Hauptprojekt Phase 2 (Sandwich-HP2), Teilprojekt B	 115
02 E 12194	Interaktionen zwischen den geotechnischen Barrieren eines Endlagers in tonreichen Sedimentgesteinsformationen - Phase 1 (INTERESE)	 122
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	 124
02 E 12224A	Verbundprojekt: Rückhaltung und Löslichkeit dosisrelevanter Radionuklide unter den reduzierenden Nahfeldbedingungen eines Endlagers im Ton- oder Kristallingestein (RULET), Teilprojekt A	 133
02 E 12234A	Verbundprojekt: Bewertung der Integrität von Endlagerbehältern unter Korrosionseinfluss im Kristallingestein (BEnKo), Teilprojekt A	 141
02 E 12254	Methodisches Vorgehen zur Entwicklung und Validierung von Modellen zur langzeitsicherheitslichen Bewertung von Endlagern für radioaktive Abfälle (DOSIS)	 151

Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e.V., Bautzner Landstraße 400, 01328 Dresden

02 E 11870B	Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt B	 27
02 E 12052A	Verbundprojekt: Konkurrenz und Reversibilität bei Sorptionsvorgängen (KuRSiv), Teilprojekt A	 70
02 E 12072B	Verbundprojekt: MgO-Beton C3 als langzeitbeständiges und schnellwirksames Verschlusselement für Schachtverschlüsse zukünftiger HAW-Endlager im Salinar (MgO-C3), Teilprojekt B	 86
02 E 12112A	Verbundprojekt: Systematic sensitivity analysis for mechanistic geochemical models using field data from crystalline rock (SANGUR), Teilprojekt A	 93
02 E 12224B	Verbundprojekt: Rückhaltung und Löslichkeit dosisrelevanter Radionuklide unter den reduzierenden Nahfeldbedingungen eines Endlagers im Ton- oder Kristallingestein (RULET), Teilprojekt B	 135

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  79

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  128

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  57

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  156
- 02 E 11849E** Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt E  158
- 02 E 11981B** Verbundprojekt: Implementierung eines Monitoringsystems zur Evaluierung der Korrosionsvorgänge an Behältermaterialien in Bentonit-basierten Endlagerkonzepten (IMKORB), Teilprojekt B  47
- 02 E 12052C** Verbundprojekt: Konkurrenz und Reversibilität bei Sorptionsvorgängen (KuRSiv), Teilprojekt C  74
- 02 E 12122B** Verbundprojekt: Stabilität von Mineralphasen des Eisens im Nahfeld eines Endlagers (STAMINA), Teilprojekt B  99
- 02 E 12153B** Verbundprojekt: Erosion von Bentonit unter In-situ Bedingungen durch Einwirkung natürlicher Wässer in geologischen Tiefenlagern (EVIDENT), Teilprojekt B  109
- 02 E 12204** Formen der Konfliktbearbeitung in der nuklearen Entsorgung (KonE)  164

Karlsruher Institut für Technologie (Universitätsaufgabe), Kaiserstr. 12, 76131 Karlsruhe

- 02 E 12001A** Verbundprojekt: Sandwich Support Projekt 1: Heterogene Bentonithydratation (SANDWICH-SP1), Teilprojekt A  51

- 02 E 12163A** Verbundprojekt: Vertikales hydraulisches Dichtsystem nach dem Sandwich-Prinzip - Hauptprojekt Phase 2 (Sandwich-HP2), Teilprojekt A  113

Leibniz Universität Hannover, Welfengarten 1, 30167 Hannover

- 02 E 11870E** Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt E  33
- 02 E 11870F** Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt F  35
- 02 E 11981C** Verbundprojekt: Implementierung eines Monitoringsystems zur Evaluierung der Korrosionsvorgänge an Behältermaterialien in Bentonit-basierten Endlagerkonzepten (IMKORB), Teilprojekt C  49

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  160

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)  43
- 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  82
- 02 W 6281** Antineutrino-Detektion zur Überwachung radioaktiver Abfälle (NU-SAFEGUARDS)  168

Ruhr-Universität Bochum, Universitätsstr. 150, 44801 Bochum

- 02 E 12001B** Verbundprojekt: Sandwich Support Projekt 1: Heterogene Bentonithydratation (SANDWICH-SP1), Teilprojekt B  53

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  41

02 E 12072A	Verbundprojekt: MgO-Beton C3 als langzeitbeständiges und schnellwirksames Verschlusselement für Schachtverschlüsse zukünftiger HAW-Endlager im Salinar (MgO-C3), Teilprojekt A	 84
02 E 12143	Feinerkundung der Steinsalzkontur im Bereich zukünftiger Verschlussbauwerke in HAW-Endlagern durch in situ Raman-Spektroskopie (SaRa)	 105
02 E 12163C	Verbundprojekt: Vertikales hydraulisches Dichtsystem nach dem Sandwich-Prinzip - Hauptprojekt Phase 2 (Sandwich-HP2), Teilprojekt C	 117
02 E 12173	Entwicklung eines salzgrusbasierten Versatzkonzepts unter der Option Rückholbarkeit - Phase 2 (SAVER II)	 119
02 E 12244B	Verbundprojekt: KI-unterstützte Stoffmodellierung am Beispiel von Bentonit (KI-Stoff), Teilprojekt B	 147

Technische Universität Carolo-Wilhelmina zu Braunschweig, Pockelsstr. 14, 38106 Braunschweig

02 E 12102	Entwicklung einer selbstlernenden Modellierungsmethodik zu geomechanischen und geotechnischen Prozessen am Beispiel der Planungs- und Auffahrungsphase einer Einlagerungsstrecke eines Tiefenlagers (SEMOTI)	 90
02 E 12244C	Verbundprojekt: KI-unterstützte Stoffmodellierung am Beispiel von Bentonit (KI-Stoff), Teilprojekt C	 149

Technische Universität Clausthal, Adolph-Römer-Straße 2A, 38678 Clausthal-Zellerfeld

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	 60
02 E 12082	Langzeitsicheres Abdichtungselement aus Salzschnittblöcken - Durchführung, Auswertung und Reanalyse von THM-Versuchen unter triaxialer Extensionsbeanspruchung (SSBVIER)	 88
02 E 12112B	Verbundprojekt: Systematic sensitivity analysis for mechanistic geochemical models using field data from crystalline rock (SANGUR), Teilprojekt B	 95
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	 130

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  76

Technische Universität München, Arcisstraße 21, 80333 München

- 02 E 11860E** Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt E  19

- 02 E 11870D** Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt D  31

Universität des Saarlandes, Campus, 66123 Saarland

- 02 E 11860D** Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt D  17

Universität Greifswald, Domstr. 11, 17489 Greifswald

- 02 E 11870C** Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt C  29

Universität Heidelberg, Grabengasse 1, 69117 Heidelberg

- 02 E 11860H** Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt H  23

Universität Kassel, Mönchebergstr. 19, 34125 Kassel

- 02 E 11849J** Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt J  162

Universität Potsdam, Am Neuen Palais 10, 14469 Potsdam

- 02 E 11860F** Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt F  21