

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

**PTE Nr. 64**

BMUV geförderte FuE-Vorhaben zur  
„Endlagerung radioaktiver Abfälle“

Berichtszeitraum: 1. Juli - 31. Dezember 2022

Projektträger Karlsruhe (PTKA)  
Entsorgung

**April 2023**

## PTE-Berichte

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

Die Fortschrittsberichtsreihen behandeln folgende Themenschwerpunkte:

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

Die Fortschrittsberichtsreihen sind online verfügbar:

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

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

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

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

## Vorwort

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

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

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

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

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

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

Der Bericht ist wie folgt gegliedert:

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

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

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

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

---

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



## **Inhaltsverzeichnis**

<b>1</b>	<b>Verzeichnis der Vorhaben gemäß FuE-Bereiche.....</b>	<b>1</b>
C	FORSCHUNGSGEBIET ENDLAGERUNG .....	1
C1	Standortauswahl .....	1
C2	Sicherheits- und Endlagerkonzepte; Endlagertechnik und (geo-)technische Barrieren .....	3
C3	Sicherheitsnachweis .....	7
D	QUERSCHNITTAUFGABEN .....	11
D1	Wissens- und Kompetenzmanagement .....	11
D2	Sozio-technische Fragestellungen .....	13
D3	Kernmaterialüberwachung .....	15
<b>2</b>	<b>Formalisierte Zwischenberichte .....</b>	<b>17</b>
2.1	Vorhaben Bereich C1 – C3 .....	17
2.2	Vorhaben Bereich D1 – D3 .....	150
<b>3</b>	<b>Information zu Publikationen sowie zu Aus- und Weiterbildung.....</b>	<b>177</b>
<b>4</b>	<b>Verzeichnis der Forschungsstellen .....</b>	<b>179</b>



# 1 Verzeichnis der Vorhaben gemäß FuE-Bereiche

## C Forschungsgebiet Endlagerung

### C1 Standortauswahl

<b>02 E 11829</b>	Tonsteinforschung im Felslabor Mont Terri ab Phase 25 (MonTe-25)	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln</b>	 54
<b>02 E 11931</b>	Einfluss der thermischen Reife auf die gekoppelten hydro-mechanischen Eigenschaften niedrig-durchlässiger Tonsteine – Feld & Laborskala (Maturity)	<b>Rheinisch-Westfälische Technische Hochschule Aachen</b>	 106
<b>02 E 11991</b>	Entwicklung und Validation einer neuartigen Versuchstechnik für triaxiale Kriechversuche bei geringer deviatorischer Belastung (KRIECHTECH)	<b>TU Clausthal, Clausthal-Zellerfeld</b>	 130



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

<b>02 E 11577A</b>	Verbundprojekt: Sicherheitsanalytische Untersuchungen zu Endlagersystemen im Kristallin (SUSE), Teilprojekt A	<b>BGE Technology GmbH, Peine</b>	 22
<b>02 E 11577B</b>	Verbundprojekt: Sicherheitsanalytische Untersuchungen zu Endlagersystemen im Kristallin (SUSE), Teilprojekt B	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln</b>	 24
<b>02 E 11627</b>	Arteigene Versatz- und Verschlussmaterialien für die Endlagerung hochradioaktiver Abfälle in Tonformationen (AVET)	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln</b>	 26
<b>02 E 11688</b>	Langzeitsicheres Abdichtungselement aus Salzschnittblöcken - Durchführung, Auswertung und Reanalyse von THM-Versuchen (Salzschnittblöcke III)	<b>TU Clausthal, Clausthal-Zellerfeld</b>	 30
<b>02 E 11698</b>	Untersuchung thermisch-hydraulisch-mechanisch-chemischer Einwirkungen auf zementbasierte Dichtelemente (THYMECZ)	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln</b>	 32
<b>02 E 11759A</b>	Verbundprojekt: Grimsel Felslabor: In-situ Experimente zur Bentonit Langzeit-Stabilität und der Radionuklidmobilität an der Grenzfläche Bentonit - Kristallin (KOLLORADO-e3), Teilprojekt A	<b>Friedrich-Schiller-Universität Jena</b>	 34
<b>02 E 11759B</b>	Verbundprojekt: Grimsel Felslabor: In-situ-Experimente zur Bentonit Langzeit-Stabilität und der Radionuklidmobilität an der Grenzfläche Bentonit - Kristallin (KOLLORADO-e3), Teilprojekt B	<b>Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Eggenstein-Leopoldshafen</b>	 36
<b>02 E 11759C</b>	Verbundprojekt: Grimsel Felslabor: In-situ-Experimente zur Bentonit Langzeit-Stabilität und der Radionuklidmobilität an der Grenzfläche Bentonit - Kristallin (KOLLORADO-e3), Teilprojekt C	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln</b>	 38
<b>02 E 11769B</b>	Verbundprojekt: MgO-Spritzbeton für Streckenverschlüsse für HAW-Endlager im Steinsalz (MgO-S3), Teilprojekt B	<b>Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e. V., Dresden</b>	 40
<b>02 E 11799A</b>	Verbundprojekt: Vertikales hydraulisches Dichtsystem nach dem Sandwich-Prinzip - Hauptprojekt (SANDWICH-HP), Teilprojekt A	<b>Karlsruher Institut für Technologie (KIT)</b>	 42
<b>02 E 11799B</b>	Verbundprojekt: Vertikales hydraulisches Dichtsystem nach dem Sandwich-Prinzip - Hauptprojekt (SANDWICH-HP), Teilprojekt B	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln</b>	 44

<b>02 E 11799C</b>	Verbundprojekt: Vertikales hydraulisches Dichtsyste- m nach dem Sandwich-Prinzip - Hauptprojekt (SANDWICH-HP), Teilprojekt C	<b>Technische Universi- tät Bergakademie Freiberg</b>	 46
<b>02 E 11819</b>	Mineralumwandlung und Sorption bei erhöhten Tem- peraturen in geklüfteten Kristallingesteinen und Barri- erematerial (MUSE)	<b>Gesellschaft für An- lagen- und Reaktor- sicherheit (GRS) gGmbH, Köln</b>	 52
<b>02 E 11839</b>	Entwicklung eines Leitfadens zur Auslegung und zum Nachweis von geotechnischen Barrieren für ein HAW Endlager in Salzformationen (RANGERS)	<b>BGE Technology GmbH, Peine</b>	 56
<b>02 E 11870A</b>	Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Ben- tonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt A	<b>Gesellschaft für An- lagen- und Reaktor- sicherheit (GRS) gGmbH, Köln</b>	 78
<b>02 E 11870B</b>	Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Ben- tonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt B	<b>Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e. V., Dresden</b>	 80
<b>02 E 11870C</b>	Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Ben- tonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt C	<b>Universität Greifs- wald</b>	 82
<b>02 E 11870D</b>	Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Ben- tonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt D	<b>TU München</b>	 84
<b>02 E 11870E</b>	Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Ben- tonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt E	<b>Leibniz Universität Hannover</b>	 86
<b>02 E 11870F</b>	Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Ben- tonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt F	<b>Leibniz Universität Hannover</b>	 88
<b>02 E 11880</b>	Sicherheitsrelevante Untersuchungen zur Bentonitau- f-sättigung (SIRUB)	<b>Gesellschaft für An- lagen- und Reaktor- sicherheit (GRS) gGmbH, Köln</b>	 90
<b>02 E 11900</b>	Langzeitsicherheit von Verschlussystemen in Schächten und Rampen im Vergleich (LARYSSA)	<b>BGE Technology GmbH, Peine</b>	 96
<b>02 E 11911A</b>	Verbundprojekt: Vorhersage der heterogenen Radio- nuklidsorption auf Kluft- und Störungsflächen in gra- nitischen Gesteinen: Parametrisierung und Validie- rung verbesserter reaktiver Transportmodelle (WTZ- Granit), Teilprojekt A	<b>Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e. V., Dresden</b>	 98
<b>02 E 11911B</b>	Verbundprojekt: Vorhersage der heterogenen Radio- nuklidsorption auf Kluft- und Störungsflächen in gra- nitischen Gesteinen: Parametrisierung und Validie- rung verbesserter reaktiver Transportmodelle (WTZ- Granit), Teilprojekt B	<b>Friedrich-Schiller- Universität Jena</b>	 100
<b>02 E 11921A</b>	Verbundprojekt: Untersuchungen zur SEPARation von AMeridium aus hochradioaktiven Abfalllösungen (SEPAM), Teilprojekt A	<b>Forschungszentrum Jülich GmbH</b>	 102

02 E 11921B	Verbundprojekt: Untersuchungen zur SEParation von AMericiuM aus hochradioaktiven Abfalllösungen (SEPAM), Teilprojekt B	<b>Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Eggenstein- Leopoldshafen</b>	104
02 E 11951A	Verbundprojekt: Kompaktion von Salzgrus für den sicheren Einschluss - Phase 2 (KOMPASS II), Teilprojekt A	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln</b>	110
02 E 11951B	Verbundprojekt: Kompaktion von Salzgrus für den sicheren Einschluss - Phase 2 (KOMPASS II), Teilprojekt B	<b>BGE Technology GmbH, Peine</b>	112
02 E 11951C	Verbundprojekt: Kompaktion von Salzgrus für den sicheren Einschluss - Phase 2 (KOMPASS II), Teilprojekt C	<b>IfG Institut für Gebirgsmechanik GmbH, Leipzig</b>	114
02 E 11951D	Verbundprojekt: Kompaktion von Salzgrus für den sicheren Einschluss - Phase 2 (KOMPASS II), Teilprojekt D	<b>TU Clausthal, Clausthal-Zellerfeld</b>	116
02 E 11961	Entwicklung eines salzgrusbasierten Versatzkonzepts unter der Option Rückholbarkeit - Phase 1 (SAVER)	<b>Technische Universität Bergakademie Freiberg</b>	118
02 E 11971A	Verbundprojekt: Anwendbarkeit von Niedertemperatur-Salzschnmelzen für Verschlussmaßnahmen von Endlagern für radioaktiver Abfälle im Wirtsgestein Salz (SalVE), Teilprojekt A	<b>Technische Universität Bergakademie Freiberg</b>	120
02 E 11971B	Verbundprojekt: Anwendbarkeit von Niedertemperatur-Salzschnmelzen für Verschlussmaßnahmen von Endlagern für radioaktiver Abfälle im Wirtsgestein Salz (SalVE), Teilprojekt B	<b>BGE Technology GmbH, Peine</b>	122
02 E 11981A	Verbundprojekt: Implementierung eines Monitoring-systems zur Evaluierung der Korrosionsvorgänge an Behältermaterialien in Bentonit-basierten Endlagerkonzepten (IMKORB), Teilprojekt A	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln</b>	124
02 E 11981B	Verbundprojekt: Implementierung eines Monitoring-systems zur Evaluierung der Korrosionsvorgänge an Behältermaterialien in Bentonit-basierten Endlagerkonzepten (IMKORB), Teilprojekt B	<b>Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Eggenstein- Leopoldshafen</b>	126
02 E 11981C	Verbundprojekt: Implementierung eines Monitoring-systems zur Evaluierung der Korrosionsvorgänge an Behältermaterialien in Bentonit-basierten Endlagerkonzepten (IMKORB), Teilprojekt C	<b>Leibniz Universität Hannover</b>	128
02 E 12001A	Verbundprojekt: Sandwich Support Projekt 1: Heterogene Bentonithydratation (SANDWICH-SP1), Teilprojekt A	<b>Karlsruher Institut für Technologie (KIT)</b>	132
02 E 12001B	Verbundprojekt: Sandwich Support Projekt 1: Heterogene Bentonithydratation (SANDWICH-SP1), Teilprojekt B	<b>Ruhr-Universität Bochum</b>	134

- 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**  146
- 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.**  148

### C3 Sicherheitsnachweis

<b>02 E 11446A</b>	Verbundprojekt: Weiterentwicklung und Qualifizierung der gebirgsmechanischen Modellierung für die HAW-Endlagerung im Steinsalz (WEIMOS), Teilprojekt A	<b>Dr. Andreas Hampel, Mainz</b>	📖 18
<b>02 E 11466</b>	Entwicklung von Rechenmodulen für die integrierte Modellierung von Transportprozessen im einschlusswirksamen Gebirgsbereich (RepoTREND+)	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln</b>	📖 20
<b>02 E 11668A</b>	Verbundprojekt: Smart-K <sub>d</sub> in der Langzeitsicherheitsanalyse - Anwendungen (SMILE), Teilprojekt A	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln</b>	📖 28
<b>02 E 11809A</b>	Verbundprojekt: Weiterentwicklung von d <sup>3f++</sup> : Hydrogeologische Modellierung im regionalen Maßstab (HYMNE), Teilprojekt A	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln</b>	📖 48
<b>02 E 11809B</b>	Verbundprojekt: Weiterentwicklung von d <sup>3f++</sup> : Hydrogeologische Modellierung im regionalen Maßstab (HYMNE), Teilprojekt B	<b>Johann Wolfgang Goethe-Universität Frankfurt am Main</b>	📖 50
<b>02 E 11850A</b>	Verbundprojekt: Deutsch-chinesische Entsorgungsforschung – Pilotprojekt: Reanalysis of BRIUG THM Mock-up Test (ELF-China-Pilot), Teilprojekt A	<b>Helmholtz-Zentrum für Umweltforschung GmbH – UFZ -, Leipzig</b>	📖 58
<b>02 E 11850F</b>	Verbundprojekt: Deutsch-chinesische Entsorgungsforschung – Pilotprojekt: Reanalysis of BRIUG THM Mock-up Test (ELF-China-Pilot), Teilprojekt F	<b>Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Eggenstein-Leopoldshafen</b>	📖 60
<b>02 E 11860A</b>	Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt A	<b>Johannes Gutenberg-Universität Mainz</b>	📖 62
<b>02 E 11860B</b>	Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt B	<b>Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e. V.</b>	📖 64
<b>02 E 11860C</b>	Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt C	<b>Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Eggenstein-Leopoldshafen</b>	📖 66

<b>02 E 11860D</b>	Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt D	<b>Universität des Saarlandes</b>	 68
<b>02 E 11860E</b>	Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt E	<b>TU München</b>	 70
<b>02 E 11860F</b>	Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt F	<b>Universität Potsdam</b>	 72
<b>02 E 11860G</b>	Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt G	<b>TU Dresden</b>	 74
<b>02 E 11860H</b>	Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt H	<b>Universität Heidelberg</b>	 76
<b>02 E 11890A</b>	Verbundprojekt: Entwicklung und Test eines erweiterten Hoek-Brown Stoffmodells zur Berücksichtigung anisotropen Festigkeitsverhaltens bei der Anwendung der Integritätskriterien für kristalline Wirtsgesteine (BARIK), Teilprojekt A	<b>BGE Technology GmbH, Peine</b>	 92
<b>02 E 11890B</b>	Verbundprojekt: Entwicklung und Test eines erweiterten Hoek-Brown Stoffmodells zur Berücksichtigung anisotropen Festigkeitsverhaltens bei der Anwendung der Integritätskriterien für kristalline Wirtsgesteine (BARIK), Teilprojekt B	<b>Technische Universität Bergakademie Freiberg</b>	 94
<b>02 E 11941</b>	Wissenschaftliche Grundlagen zum Nachweis der Langzeitsicherheit von Endlagern (WiGru-9)	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln</b>	 108
<b>02 E 12012A</b>	Verbundprojekt: Weiterentwicklung von d <sup>3f++</sup> : Hydrogeologische Modellierung im regionalen Maßstab (HYMNE II), Teilprojekt A	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH</b>	 136
<b>02 E 12012B</b>	Verbundprojekt: Weiterentwicklung von d <sup>3f++</sup> : Hydrogeologische Modellierung im regionalen Maßstab (HYMNE II), Teilprojekt B	<b>Johann Wolfgang Goethe-Universität Frankfurt am Main</b>	 138
<b>02 E 12032</b>	Methoden zur experimentellen und numerischen Analyse der geologischen Barriere eines Endlagers in tonreichen Sedimentgesteinsformationen (MAGNUS)	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH</b>	 140

- 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 TECHNO-  
LOGY GmbH**  142
- 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. A Verbundprojekt: Weiterentwicklung von d<sup>3f++</sup>: Hydrogeologische Modellierung im regionalen Maßstab (HYMNE II), Teilprojekt B **Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS)  
gGmbH**  144



**D Querschnittsaufgaben**

**D1 Wissens- und Kompetenzmanagement**



## D2 Sozio-technische Fragestellungen

<b>02 E 11849A</b>	Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt A	<b>TU Clausthal, Clausthal-Zellerfeld</b>	📖 152
<b>02 E 11849B</b>	Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt B	<b>Christian-Albrechts-Universität zu Kiel</b>	📖 154
<b>02 E 11849C</b>	Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt C	<b>Freie Universität Berlin</b>	📖 156
<b>02 E 11849D</b>	Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt D	<b>Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Eggenstein-Leopoldshafen</b>	📖 158
<b>02 E 11849E</b>	Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt E	<b>Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Eggenstein-Leopoldshafen</b>	📖 160
<b>02 E 11849F</b>	Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt F	<b>Leibniz Universität Hannover</b>	📖 162
<b>02 E 11849G</b>	Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt G	<b>Öko-Institut. Institut für angewandte Ökologie e. V.</b>	📖 164
<b>02 E 11849H</b>	Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt H	<b>TU Berlin</b>	📖 166
<b>02 E 11849I</b>	Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt I	<b>TU Carolo-Wilhelmina zu Braunschweig</b>	📖 168
<b>02 E 11849J</b>	Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt J	<b>Universität Kassel</b>	📖 170



**D3 Kernmaterialüberwachung**

- |                  |   |  |       |
|------------------|---|--|-------|
| <b>02 W 6279</b> | Neu- und Weiterentwicklung von Konzepten, Methoden und Techniken für die internationale Kernmaterialüberwachung, insbesondere im Rahmen der nuklearen Entsorgung (SAFEGUARDS-3) | <b>Forschungszentrum Jülich</b>                            | 📖 172 |
| <b>02 W 6281</b> | Antineutrino-Detektion zur Überwachung radioaktiver Abfälle (NU-SAFEGUARDS)   | <b>Rheinisch-Westfälische Technische Hochschule Aachen</b> | 📖 174 |



## **2 Formalisierte Zwischenberichte**

### **2.1 Vorhaben Bereich C1 – C3**

<b>Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer:</b> Dr. Andreas Hampel, Grünberger Str. 56, 55129 Mainz		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11446A</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Weiterentwicklung und Qualifizierung der gebirgsmechanischen Modellierung für die HAW-Endlagerung im Steinsalz (WEIMOS), Teilprojekt A		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Förderkonzept „Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle (2015 – 2018)“ des Bundesministeriums für Wirtschaft und Energie (BMWi) und des Projektträgers Karlsruhe, Wassertechnologie und Entsorgung (PTKA-WTE), Karlsruher Institut für Technologie		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.04.2016 bis 31.12.2022	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2022 bis 31.12.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 723.810,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Andreas Hampel	

## 1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

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

## 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

- AP 1 Verformungsverhalten bei kleinen Deviatorspannungen
- AP 2 Einfluss von Temperatur und Spannungszustand auf die Schädigungsrückbildung
- AP 3 Verformungsverhalten infolge von Extensionsbelastungen

- AP 4 Einfluss von Grenzflächen im Steinsalz auf die Verformung (Wechselagerung)
- AP 5 Virtuelle Demonstratoren
- AP 6 Administrative Arbeiten

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Der Zuwendungsempfänger (ZE) koordinierte das Vorhaben und betreute die Kooperation mit den Sandia National Laboratories. Er beteiligte sich im Teilprojekt A mit dem von ihm entwickelten Stoffmodell CDM und verwendete für die Modellberechnungen der Untertageszenarien das Finite-Differenzen-Programm FLAC3D (Itasca). Die gemeinsamen Arbeiten der Projektpartner endeten am 31.03.2022, daran schloss sich im Teilprojekt A die Erstellung des Syntheseberichtes bis zum 31.12.2022 an.

Im Berichtszeitraum schloss der ZE den Entwurf des gemeinsamen Syntheseberichtes zum Verbundprojekt WEIMOS ab und übermittelte ihn den Projektpartnern zur Durchsicht und für eventuelle Ergänzungen. In dem Synthesebericht werden die Arbeiten der Partner zusammenfassend dargestellt, deren Ergebnisse miteinander verglichen und Schlussfolgerungen gezogen. Der Bericht bildet zusammen mit den Einzelberichten der Partner im Anhang den Abschlussbericht zum Verbundprojekt WEIMOS.

Außerdem erstellte der ZE eine zusammenfassende Präsentation über die Arbeiten und Ergebnisse des Verbundes und stellte sie am 7. September 2022 auf dem 12th US/German Workshop on Salt Repository Research, Design, and Operation in Braunschweig vor.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Die Veröffentlichung des Abschlussberichtes zum Verbundprojekt WEIMOS ist für das erste Quartal 2023 geplant.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

- Hampel, A., C. Lüdeling, R.-M. Günther, J.Q. Sun-Kurczinski, R. Wolters, U. Düsterloh, K.-H. Lux, S. Yıldırım, D. Zapf, S. Wacker, I. Epkenhans, J. Stahlmann, B. Reedlunn (2022): WEIMOS: Simulations of two geomechanical scenarios in rock salt resembling structures at WIPP. S. 421-435, \*)
  - Lüdeling, C., R.-M. Günther, A. Hampel, J.Q. Sun-Kurczinski, R. Wolters, U. Düsterloh, K.-H. Lux, S. Yıldırım, D. Zapf, S. Wacker, I. Epkenhans, J. Stahlmann & B. Reedlunn (2022): WEIMOS: Creep of Rock Salt at Low Deviatoric Stresses. S. 130-140, \*)
  - Wolters, R., J.Q. Sun-Kurczinski, U. Düsterloh, K.-H. Lux, R.-M. Günther, C. Lüdeling, A. Hampel, S. Yıldırım, D. Zapf, S. Wacker, I. Epkenhans, J. Stahlmann & B. Reedlunn (2022): WEIMOS: Laboratory investigation and numerical simulation of damage reduction in rock salt. S. 190-199, \*)
  - S.R. Sobolik, C. Vignes, S. Buchholz, E. Keffeler & B. Reedlunn (2022): WEIMOS: Shear behaviors of bedded salt clay seams and their impact on disposal room porosity. S. 168-179, \*)
- \*) J.H.P. de Bresser, M.R. Drury, P. A. Fokker, M. Gazzani, S.J.T. Hangx, A.R. Niemeijer, C.J. Spiers (eds.): The Mechanical Behavior of Salt X. Proceedings of the 10th Conference on the Mechanical Behavior of Salt (SaltMech X), Utrecht, The Netherlands, 06-08 July 2022. CRC Press/Balkema, Leiden (Taylor & Francis Group). ISBN: 978-1-032-28220-6, DOI: 10.1201/978100329580.

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> 02 E 11466
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Entwicklung von Rechenmodulen für die integrierte Modellierung von Transportprozessen im einschlusswirksamen Gebirgsbereich (RepoTREND+)		
<b>Zuordnung zum FuE-Förderkonzept des BMWi 2015-2018:</b> FuE-Bereich 4, FuE-Feld 4.3 Systemanalysen und Werkzeuge der Sicherheitsanalysen: Weiterentwicklung und Aktualisierung der Methoden und Rechenprogramme für Langzeitsicherheitsanalysen.		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.04.2016 bis 31.07.2023	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2022 bis 31.12.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 3.466.655,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Reiche, Tatiana	

### 1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

### 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

Das Arbeitsprogramm gliedert sich in sechs Arbeitspakete:

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

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

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

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

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

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

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

#### *Arbeitspaket 1*

Zur Generierung eines Rechengitters von einem Modellgebiet wird zurzeit der Gittergenerator *blockMesh* verwendet, der in der Kombination mit dem Tool *ParaView* genutzt wird. Die Arbeit mit diesen Tools ist fehleranfällig, arbeitsintensiv, nicht intuitiv und nicht benutzerfreundlich. Andere Tools sollen eingesetzt werden. Wie bereits berichtet, wurden mehrere Rechengittergeneratoren evaluiert und erwiesen sich als ungeeignet für die besonderen Erfordernisse von NaTREND.

Im Berichtszeitraum wurde ein Tool *proMesh* (open source) evaluiert. *proMesh* erfüllt bereits einige grundlegende Anforderungen. Das Tool erlaubt eine nahezu volle Kontrolle bezüglich Dimensionalität und Auflösung eines Rechengitters seitens des Benutzers. Zwei wichtige Funktionalitäten fehlen jedoch: Überprüfung sowie Verbesserung der Rechengitterqualität und Ausgabe des resultierenden Gitters in dem benötigten Format. Eine Weiterentwicklung ist notwendig. Die ersten Klärungsgespräche mit dem Entwickler diesbezüglich haben stattgefunden.

#### *Arbeitspaket 2*

Ein Konzept zur Adsorption von Schadstoffen bei zweiphasigem Transport wurde entwickelt. Folgende Aspekte sind dabei die wichtigsten:

- Die Sorption aus der Gasphase kann vernachlässigt werden.
- Die Sorption aus der Flüssigphase wird durch den linearen Ansatz (Kd-Konzept) abgebildet. Für die Abhängigkeit von dem Sättigungsgrad wurde ebenfalls ein linearer Ansatz gewählt.

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

#### *Arbeitspaket 3*

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

Das Statistiktool RepoSTAR wurde überarbeitet. Die Methode COSI wurde integriert, Experteneinstellungen für EASI und COSI wurden definiert und über die bereits vorhandenen Eingabestrukturen bereitgestellt. Die Oberfläche RepoSUN wurde entsprechend angepasst.

Die XENIA-Module, die für die Definition eines Nahfeld-Rechenlaufs erforderlich sind, wurden weiterentwickelt. Speziell ist die Definition von einigen radionuklid-/elementspezifischen Parametern sowie Materialeigenschaften hinzugekommen.

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

Der Programmcode wurde auf die aktuelle gcc-Compiler-Version umgestellt, was nunmehr ermöglicht, neue C++-20 Funktionalitäten zu integrieren. Diese erlauben u. a. eine deutliche Performanceverbesserung.

#### *Arbeitspaket 4*

Zum Validieren von NaTREND soll ein konzeptuell einfaches und möglichst gut kontrollierbares Experiment im geotechnischen Labor durchgeführt werden. Im Berichtszeitraum wurden Vorversuche durchgeführt, um die Machbarkeit von Ideen für den Versuchsaufbau sowie die spätere Versuchsführung zu überprüfen. Aktuell wird an verbesserten Einbau- sowie Befeuchtungsmethoden für die Proben gearbeitet. Es werden unterschiedliche Techniken zum Messen der Feuchtigkeit getestet.

Es wurden Testrechnungen zum Radionuklidtransport konzipiert und durchgeführt.

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

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

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

#### *Arbeitspaket 6*

Der vorliegende Bericht wurde erstellt.

### 4. Geplante weitere Arbeiten

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

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

-

<b>Auftragnehmer:</b> BGE TECHNOLOGY GmbH, Eschenstraße 55, 31224 Peine		<b>Förderkennzeichen:</b> 02 E 11577A	
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Sicherheitsanalytische Untersuchungen zu Endlagersystemen im Kristallin (SUSE)			
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> FuE-Feld 2.2: Charakterisierung des Geosystems FuE-Feld 3.3: Geotechnische Barrieren FuE-Feld 4.1: Phänomene, Prozesse und Modelle FuE-Feld 4.2: Methodische Grundlagen der Nachweisführung FuE-Feld 4.3: Systemanalysen und Werkzeuge der Sicherheitsanalysen			
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.06.2017 bis 31.05.2023		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2022 bis 31.12.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 1.502.960,74 EUR		<b>Projektleiter:</b> Dr. Christian Müller	

### 1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

### 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

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

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP5: Ziel dieses APs ist der Vergleich mehrerer Modellierungsansätze, die zur Simulation von Strömungs- und Transportprozessen in geklüfteten Gesteinen typischerweise verwendet werden. Im Vergleich berücksichtigt sind der *fracture continuum* Ansatz, zwei Upscaling-Ansätze (*Oda*-Ansatz und das Python Skript *mapDFN*) sowie *discrete fracture network* (DFN) basierte Ansätze. Durch den Vergleich über Benchmarkmodellierungen sollen Ungewissheiten charakterisiert werden, die bei der Implementierung des numerischen Modells aus dem geologischen Modell entstehen und mit dem entsprechenden Modellierungsansatz verbunden sind. Die Benchmarks unterscheiden sich hauptsächlich durch die Anzahl der zu berücksichtigenden Brüche und den zu simulierenden physikalischen Prozessen. Die ersten drei Benchmark-Fälle (Rechenfall 1, 2 und 3) beschränken sich auf eine advektive Strömung, während die letzten drei Fälle (Rechenfall 4, 5 und 6) zusätzlich einen Stofftransport berücksichtigen. Die zur Orientierung im Vorfeld der Benchmark-Berechnungen durchgeführten „Testrechnungen“ wurden abgeschlossen und es wurde mit der Durchführung der Rechenfälle 1, 2 und 3 begonnen. Teilweise wurden diese zum Ende des Berichtszeitraums abgeschlossen und die Ergebnisse sollen zu Beginn des Jahres 2023 unter den Projektpartnern diskutiert werden. Erste Ergebnisse zeigen, dass die DFN-basierten Ansätze, welche die Klüfte als niederdimensionale Elemente im Berechnungsgitter betrachten, gegenüber der analytischen Lösung (Vergleich der Durchflussmengen) die besten Ergebnisse erzielen. Bei Rechenfällen (Rechenfall 2 und 3), welche nicht über analytischen Weg gelöst werden können, stellen sie daher die Referenzlösung dar. Der *fracture continuum* Ansatz zeigt für die Rechenfälle 1 und 2 je nach verwendeten Berechnungscode (FLAC3D, OGS und d3f++) Fehler im Bereich 10%. Die Upscaling-Ansätze (*Oda*-Ansatz und das Python Skript *mapDFN*) konnten bislang keine zufriedenstellenden Ergebnisse liefern.

Zum Ende des Berichtszeitraums wurden mit der Umsetzung der Rechenfalls 4 begonnen, welcher zusätzlich einen Stofftransport berücksichtigt. Für einen Vergleich wurden entsprechende analytische Lösungen gesichtet und die entsprechenden Berechnungen in einem Python-Skript umgesetzt. Zum Einsatz kommen die Lösungen nach Tang et al. 1981 und Liu et al. 2018. Diese Lösungen betrachten den Stofftransport in einer Einzelkluft mit Dispersion in der Klufft, Diffusion in die Matrix sowie Sorption und Zerfall. Die dafür benötigten Eingangsparameter für die Numerik wurden festgelegt und erste Berechnungen gestartet.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

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

AP5: Auswertung, Diskussion und Dokumentation der Ergebnisse der Benchmarkberechnungen für die Rechenfälle 1, 2 und 3. Durchführung und Dokumentation der Rechenfälle 4, 5 und 6.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

-

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> 02 E 11577B	
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Sicherheitsanalytische Untersuchungen zu Endlagersystemen im Kristallin (SUSE)			
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> C2.1: Sicherheits- und Endlagerkonzepte, Punkt 3 FuE-Feld C3.1: Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-)Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung, Punkt 1, 2 FuE-Feld C3.3: Werkzeuge der Sicherheitsanalysen, Punkt 2			
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.06.2017 bis 31.05.2023		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2022 bis 31.12.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 1.704.840,00 EUR		<b>Projektleiterin:</b> Dr. Judith Flügge	

## 1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

## 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

Bei der Durchführung des Vorhabens werden folgende Arbeitspakete bearbeitet:

AP 1: Bemessung des geotechnischen Verschlussystems

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

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

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

AP 5: Regionale 3D-Strömungs- und Transportmodelle

AP 6: Bewertung und Dokumentation

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

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

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Zur Diskussion der Ergebnisse und zur Absprache der weiteren Arbeiten wurden am 20.09.2022 und am Arbeitsgespräche mit BGE TEC und BGR durchgeführt.

AP 4: Als Ersatz für die nicht verfügbaren russischen Proben wurden nach Absprache mit PTKA von SÚRAU drei Proben aus dem UTL Bukov – zwei Kalzitfüllungen mit dem angrenzenden Migmatit und ein ungestörter Migmatit – an die BGR im Oktober 2022 geliefert. Diese Proben werden von der BGR derzeit charakterisiert, um relevante Unterproben für Auslaugungsversuche sowie Teil- und Vollaufschlüsse im Braunschweiger GRS-Labor zu gewinnen. Eine detaillierte Versuchsplanung für die im GRS-Labor durchzuführenden Untersuchungen wurde aufgestellt.

AP 5: Die Testrechnungen wurden abgeschlossen. Die Ergebnisse zeigen ein sehr heterogenes Bild, je nachdem, welche Methode verwendet wurde (mit oder ohne Korrekturfunktion, Verwendung einer anisotropen Permeabilität, erneute Diskretisierung). Die Upscaling-Ansätze („Oda-approach“ und „mapDFN-approach“) konnten bislang keine zufriedenstellenden Ergebnisse liefern.

Die Modellierung der Benchmarks wurde begonnen. Die Rechenfälle 1, 2 und 3 unterscheiden sich in der Anzahl und der räumlichen Lage der Klüfte. Der erste Rechenfall ähnelt den vorangegangenen Testrechnungen, Rechenfall 2 bildet 4 Klüfte mit verschiedenen Einfallswinkeln und Überschneidungspunkten ab und Rechenfall 3 enthält 43 Klüfte mit unterschiedlicher Größe und Ausrichtung. Die *fracture continuum*-Rechnungen mit isotropen Permeabilitäten wurden weitestgehend abgeschlossen, die Auswertung erfolgt derzeit. Eine erste Auswertung zeigt, dass zwischen den betrachteten Codes FLAC3D, d3f++ und OGS eine gute Übereinstimmung hergestellt werden kann.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

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

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

AP 5: Durchführung der Benchmark-Rechenfälle mittels des Oda-Ansatzes und der Rechenfälle 4, 5 und 6 (Transportberechnung für die Rechenfälle 1, 2 und 3); Vergleichende Analysen im Hinblick auf Transportmodellierungen; Durchführung von Strömungs- und Transportberechnungen

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

keine -

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> 02 E 11627	
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Arteigene Versatz- und Verschlussmaterialien für die Endlagerung hochradioaktiver Abfälle in Tonformationen (AVET)			
<b>Zuordnung zum FuE-Förderkonzept des BMWi 2015 - 2018:</b> FuE-Bereich 3: „Endlagerkonzepte und Endlagertechnik“ und FuE-Feld 3.3 „Geotechnische Barrieren“			
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.11.2017 bis 31.05.2024		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2022 bis 31.12.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 1.813.589,00 EUR		<b>Projektleiter:</b> Dr.-Ing. Chun-Liang Zhang	

## 1. Vorhabenziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

## 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

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

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

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

Die Versuche zur Bestimmung von Quelldruck, Wasserpermeabilität und Gasströmungsverhalten von Tonstein-Bentonit-Mischungen mit unterschiedlichen Verhältnissen wurden beendet und anschließend ausgewertet.

Die Versuche zu Temperatureinflüssen auf die Eigenschaften von Tonstein-Bentonit-Mischungen wurden beendet und anschließend ausgewertet.

Die Versuche zur Ermittlung des Gasflussverhaltens der vorgeschädigten und wiederverheilten COX- und OPA-Tonstein wurden beendet und anschließend ausgewertet.

Die vollständigen Ergebnisse werden in einem Abschlussbericht des Projekts zusammengefasst. Ein Entwurf des Berichts wurde erstellt und wird derzeit für die endgültige Fassung überprüft.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

- Erstellung des Abschlussberichts

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

- Zhang, C.L.: Experimental Study of Gas Transport and Impact on Self-Sealing of Fractures in indurated Claystones, in the progress meeting of the Project EURAD-WP-6 GAS, 04.10. 2022.

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> 02 E 11668A	
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Smart-K <sub>d</sub> in der Langzeitsicherheitsanalyse - Anwendungen (Teilprojekt GRS im Verbundvorhaben SMILE)			
<b>Zuordnung zum FuE-Förderkonzept des BMWi 2021 - 2025:</b> FuE-Feld C3.1 Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-)Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung; FuE-Feld C3.3 Werkzeuge der Sicherheitsanalysen Relevant für alle Wirtsgesteine			
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.09.2018 bis 31.05.2024		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2022 bis 31.12.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 1.249.122,00 EUR		<b>Projektleiter:</b> Dr. Ulrich Noseck	

## 1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

## 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

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

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP2: Abschluss der Arbeiten zu dem Testfall „Aluminium“, Dokumentation der Ergebnisse.
- AP3: Anfängliche Auswertung der experimentellen Daten zur Bestimmung von Selektivitätskoeffizienten von Muskovit für relevante Kationen, Nickel und Europium.  
Abschließende Modellierung der Oberflächenkomplexierung sowie des reaktiven Stofftransports von Daten aus Batch- und Säulenversuchen in Systemen mit Ni, Quarz und K-Feldspat.
- AP5: Weiterführung der großräumigen Strömungs- und Transportrechnungen unter Anwendung des neuen Konzepts. Überprüfung der Ergebnisse hinsichtlich der Einflüsse verschiedener klimatischer Zustände auf die Radionuklidrückhaltung.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- AP3: Abschließende Auswertung der experimentellen Daten zur Bestimmung von Selektivitätskoeffizienten von Muskovit für relevante Kationen, Nickel und Europium.  
Dokumentation der finalen Modellierungsauswertung zur Oberflächenkomplexierung sowie des reaktiven Stofftransports von Daten aus Batch- und Säulenversuchen in Systemen mit Ni, Quarz und K-Feldspat.
- AP5: Abschluss und Dokumentation der großräumigen Strömungs- und Transportrechnungen unter Anwendung des neuen Konzepts.
- AP6: Finales Projekttreffen mit HZDR und KIT-INE zur Fertigstellung des Projektabschlussberichts.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine

<b>Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer:</b> TU Clausthal - Lehrstuhl für Geomechanik und multiphysikalische Systeme		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11688</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Langzeitsicheres Abdichtungselement aus Salzschnittblöcken - Durchführung, Auswertung und Reanalyse von THM-Versuchen (Salzschnittblöcke III)		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Förderkonzept des Bundesministeriums für Wirtschaft und Energie: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle (2015-2018), Fördergebiete "3.2 - Endlagertechnik / Verfüll- und Verschlusskonzept"; "3.3 - Geotechnische Barrieren / technische Realisierbarkeit / Material und Komponenten"; "3.5 - Demonstrationsversuche".		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.09.2018 bis 31.08.2022	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2022 bis 31.08.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 616.650,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> apl. Prof. Dr.-Ing. habil. Uwe Düsterloh	

### 1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

### 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

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

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

#### AP2:

Fertigstellung der Salzschnittblöcke für einen dritten Prüfkörper mit Fugenbreite 5 mm und Salzgrusfugenfüllung.

#### AP3:

- Abschluss und Auswertung des zweiten Prüfkörpertests mit Konfiguration der Salzschnittblock-Konstruktion ohne Fugenfüllung unter eingeschränkter Axialdehnung mit einer vorgegebenen Axialdeformationstoleranz und einer konstanten Mantelspannung von 12,5 MPa als mechanischer Randbedingung mit nachfolgender Durchführung eines hydro-mechanischen Kompaktionsversuchs unter nahezu isotropen Belastungsrandbedingungen mit konstanter Mantelspannung von 12,5 / 8,5 MPa und konstanter Axialspannung von 13 / 9 MPa bei gleichzeitiger Durchführung einer Gaspermeabilitätsuntersuchung mit verschiedenen Gasdruckgradienten.
- Aufbau und Durchführung des dritten Versuchs mit Fugenbreite 5 mm und Salzgrusfugenfüllung.

#### AP4:

Numerische Reanalyse und Vergleich mit den zugehörigen Laborergebnissen

#### AP5:

Erstellung Abschlussbericht

### 4. Geplante Weiterarbeiten

#### AP3:

-

#### AP4:

-

#### AP5:

-

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Düsterloh, U., Lerche, S., Zhao, J. (2022): Pilot plant tests to demonstrate the functionality of sealing systems made of salt cut bricks, *The Mechanical Behaviour of Salt X*, CRC Press/Balkema, ISBN 9781032282206.

Düsterloh, U., Lerche, S., Zhao, J. (2022): Pilot plant tests to demonstrate the functionality of sealing systems made of salt cut bricks, *US-German Workshop, Peine, Sep. 2022*.

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln	<b>Förderkennzeichen:</b> 02 E 11698
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Untersuchung thermisch-hydraulisch-mechanisch-chemischer Einwirkungen auf zementbasierte Dichtelemente (THyMeCZ)	
<b>Zuordnung zum FuE-Förderkonzept:</b> Im Projektförderprogramm des BMWi – Forschungsförderung zur nuklearen Sicherheit (2021-2025) – ist das Vorhaben dem FuE-Feld C3.1 „Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-)Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung“, FuE Thema „Weiterentwicklung des Verständnisses zu den im Endlagersystem und der Biosphäre ablaufenden thermischen, hydraulischen, mechanischen, chemischen und biologischen (THMCb-)Prozessen und ihrer Kopplung“ zuzuordnen.	
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.09.2018 bis 31.08.2023	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2022 bis 31.12.2022
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 2.488.269,66 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Thorsten Meyer

## 1 Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

## 2 Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

## 3 Durchgeführte Arbeiten

### AP 1 – Bereitstellung von Material und Methoden

In diesem Arbeitspaket erfolgt die Zusammenstellung bzw. Entwicklung geeigneter Untersuchungsmethoden basierend auf vorlaufenden FuE-Vorhaben. Die Treffen des Arbeitskreises Betonkorrosion (AKB) wurden im letzten Halbjahr wieder aufgenommen, ein erstes Fachgespräch konnte als Präsenzveranstaltung im September 2022 durchgeführt werden, zwei weitere wurden zur Vorbereitung eines Workshops als Videokonferenzen geplant und durchgeführt.

**AP 2 – HC-Versuche**

Die im AP 2 vorgesehenen Versuche wurden bereits erfolgreich abgeschlossen.

**AP 3 – HMC-Versuche**

Die im AP 3 vorgesehenen Versuche wurden bereits erfolgreich abgeschlossen.

**AP 4 – THC-Versuche**

Die im AP 4 vorgesehenen Versuche wurden bereits erfolgreich abgeschlossen.

**AP 5 – TM-Versuche**

Die im AP 5 vorgesehenen Versuche wurden bereits erfolgreich abgeschlossen.

**AP 6 – THMC-Versuche**

Die bestellten Temperaturfühler und Druckaufnehmer konnten in die Autoklaven eingebaut werden, so dass beide Messstände nun vollständig aufgebaut worden sind. Zur Beaufschlagung des Manteldruckes haben sich die VITON-Manschetten als praktikabel und verlässlich erwiesen. Zurzeit befinden sich eine kombinierte A1- und eine kombinierte M2-Probe in den beiden Versuchständen.

**AP 7 – Modelltheoretische Untersuchungen**

Das Modellverständnis der Korrosionsprozesse soll mit Hilfe der durchgeführten Experimente, im Besonderen auch der durchgeführten Langzeitversuche, vertieft werden. Die Modellrechnungen erfolgen im 1. HJ 2023 parallel zur Auswertung der LZ-Korrosionsversuche (s. AP 10). Die Beendigung der Langzeitkorrosionsexperimente hat sich verzögert, da mehr Kaskaden durchgeführt werden können als ursprünglich angenommen. Damit kann der experimentelle Reaktionspfad zwischen Baustoff und Lösung bei noch höheren Feststoff-/Lösungsverhältnissen beobachtet werden und somit die Prognoseunsicherheit geochemischer Modelle verringert werden.

**AP 8 – Dokumentation**

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

**AP 9 – Untersuchung der Salzkörper aus der WIPP**

Die seitens SNL zur Verfügung gestellten Materialien zeigten sich als ungeeignet. SNL stellt nun die Proben selbst her und wird diese der GRS im ersten HJ 2023 zur Verfügung stellen.

**AP 10 – Langzeitkorrosionsversuche**

Bei den Langzeitkorrosionsexperimenten ist bereits die 7. Stufe erreicht worden, wobei eine deutliche Abnahme der jeweils resultierenden Lösungsmenge zu beobachten ist. Es ist jedoch noch genug Lösung vorhanden, um ein bis zwei weitere Kaskaden durchzuführen.

Bei den HC-Versuchen, die in die Langzeitkorrosionsversuche überführt worden waren, konnten bei dem Baustoff A1 im Kontakt zu NaCl-Lösung die Ergebnisse des Lösungsdurchbruches der THC-Versuche (90°C) auch an drei weiteren Proben im HC-Messstand bei 25°C bestätigt werden. Bei den Langzeit-THC-Versuchen konnte eine Durchbruchkurve (Erhöhung der Permeabilität um zwei Größenordnungen) bei der Probe „Assekontaktzone“ im Kontakt mit IP21-Lösung bei 60°C beobachtet werden.

**4 Geplante Weiterarbeiten**

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

**5 Berichte, Veröffentlichungen -**

<b>Auftragnehmer:</b> Friedrich-Schiller-Universität Jena, Fürstengraben 1, 07743 Jena		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02E11759A</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Grimsel Felslabor: In-situ-Experimente zur Bentonit Langzeit-Stabilität und der Radionuklidmobilität an der Grenzfläche Bentonit - Kristallin (KOLLORADO-e3), Teilprojekt A		
<b>Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit</b> Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte, Feld: 2.3		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.05.2019 bis 31.12.2022	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2022 bis 31.12.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 375.308,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Thorsten Schäfer	

### 1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

### 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

- AP 1: Experimentelles Programm zum kolloidgetragenen RN-Transport (KIT, FSU)
  - AP 1.1: Radionuklidtransport in kompaktiertem Bentonit
  - AP 1.2: Integrität der Bentonitbarriere
  - AP 1.3: Kolloidgetragener Radionuklidtransport
- AP 2: Modellrechnungen zum kolloidgetragenen RN-Transport (GRS, KIT, FSU)
  - AP 2.1: Benchmarkrechnungen zu thermodynamischen Daten (GRS, KIT, FSU)
  - AP 2.2: Simulationsrechnungen für das CFM Experiment LIT und Mock-Up Tests (GRS)
  - AP 2.3: Simulationsrechnungen für bisherige und weitere CFM Feldexperimente (GRS)
  - AP 2.4: Modellrechnungen/Bewertung des kolloidgetragenen RN Transports (GRS)
- AP 3: Integration der Ergebnisse und Abschlussdokumentation (GRS, KIT, FSU)

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

**AP 1:** Insgesamt 21 Erosionsexperimenten wurden mit verschiedenen Proben-Tabletten von rohem MX-80 & GMZ Bentonit, sowie aufgereinigtem Na-Montmorillonit (Na-Mnt) mit einer gezielten Zugabe von akzessorischem Quarz, (10, 20 Gew.%) und/oder Gips/Anhydrit (2-10 Gew.%), mit einer Trockendichte von ca. 1,8 g/cm<sup>3</sup> und einer konstanten Fließrate von 50 µL/min durchgeführt. Die Kontaktlösungen wurden kontinuierlich aufgefangen und standen zur weiteren chemischen und Kolloid-Analytik (Nanopartikel-Tracking-Analyse - NTA) zur Verfügung.

Nach der erfolgreichen Durchführung der letzten Reihe an Laborexperimenten unter Zuzugabe von Quarz und Gips in Na-homoionisiertem GMZ-001 Montmorillonit wurden die aufgefangenen Probenwässer auf ihre Partikeleigenschaften (Konzentration, Kolloidgrößenverteilung) untersucht sowie nass-chemisch Analysen durchgeführt. Dabei ergaben sich ähnliche Ergebnisse wie in den vorangegangenen Experimenten mit Na-homoionisiertem MX-80 Montmorillonit. Im Falle einer ausschließlichen Zugabe von Quarz beziehungsweise Quarz und 2 Gew.% Gips kam es erneut zu einer erheblichen Erosion des Ton-Anteils der Proben-Tabletten, mit Erosionsraten von bis zu 8.6E+10 Partikeln pro mL. Eine Beimischung von 5 Gew.% Gips wiederum führte zu einer Stabilisierung des Systems mit niedrigen durchschnittlichen Erosionsraten von etwa 1.0E+08 Partikeln pro mL.

Des Weiteren wurden Raster-Elektronenmikroskop-Aufnahmen an ausgewählten Proben verschiedener Experimente durchgeführt. Im Falle der Experimente mit ausgeprägter Erosion (Unterschreitung der Ca-CCC) konnten qualitativ Reste an Tonpartikeln zwischen den verbleibenden Quarzgerüsten nachgewiesen werden.

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

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Erstellung des Abschlussberichts (Abgabefrist: 30.06.2023).

Keine weiteren Arbeiten sind im Zuge des KOLLORADO-e<sup>3</sup> Projekts geplant.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Montoya, V., Noseck, U., Mattick, F., Britz, S., Blechschmidt, I., and Schäfer, T. (2022).

Radionuclide geochemistry evolution in the Long-term In-situ Test (LIT) at Grimsel Test Site (Switzerland). *Journal of Hazardous Materials* 424, 127733.

Huber, F.M., Leone, D., Trumm, M., Moreno, L.R., Neretnieks, I., Wenka, A., and Schäfer, T. (2021). Impact of rock fracture geometry on geotechnical barrier integrity – A numerical study. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences* 142, 104742.

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

<b>Auftragnehmer:</b> Karlsruher Institut für Technologie (KIT) Institut für Nukleare Entsorgung		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11759B</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Grimsel Felslabor: In-situ Experimente zur Bentonit Langzeit-Stabilität und der Radionuklidmobilität an der Grenzfläche Bentonit - Kristallin (KOLLORADO-e3)		
<b>Zuordnung zum FuE-Förderkonzept des BMWi 2015 - 2018:</b> FuE-Bereich 4, FuE-Feld 4.1 Phänomene, Prozesse und Modelle Relevant für das Wirtsgestein Granit		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.05.2019 bis 31.12.2022	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2022 bis 31.12.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 371.183,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Horst Geckeis	

## 1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Hauptziel des Vorhabens ist es, das mechanistische Verständnis der Prozesse weiter zu vertiefen, die unter naturnahen, endlagerrelevanten Bedingungen in geklüfteten Granitsystemen die Integrität der Bentonitbarriere beeinträchtigen und zu einem kolloidgetragenen Radionuklid (RN)-Transport führen können. Dies umfasst die grundlegenden Mechanismen der Bentoniterosion und Kolloidbildung am Übergang des Bentonit- Versatzes/Puffers zum Kristallgestein, die RN-Speziation, insbesondere die Wechselwirkungen zwischen RNs und Kolloiden sowie die Wechselwirkungen von gelösten RN und/oder Kolloiden mit den Gesteinsoberflächen. Die geplanten Arbeiten bauen auf den in Kolorado-e2 erzielten Erkenntnissen auf. Das experimentelle Programm im Labor und im Untertagelabor Grimsel unter Anwendung von spektroskopischen und mikroskopischen Methoden der Partner FSU und KIT-INE soll dazu beitragen, ein verbessertes mechanistisches Verständnis der Integrität der Bentonitbarriere und des kolloidgetragenen RN-Transports zu erreichen. Es soll die Übertragbarkeit der Labordaten auf natürliche Systeme überprüft und Eingangsdaten für die in der Langzeitsicherheitsanalyse von GRS verwendeten Codes CLAYPOS, COFRAME und  $d^3f_{++}$  ermittelt werden. Diese Codes sowie von KIT-INE und FSU genutzte gekoppelte reaktive Transportmodelle werden zur Beschreibung der Feldexperimente weiterentwickelt, angewandt und damit weiter qualifiziert.

## 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

- AP 1: Experimentelles Programm zum kolloidgetragenen RN-Transport (KIT, FSU)
  - AP 1.1: Radionuklidtransport in kompaktiertem Bentonit
  - AP 1.2: Integrität der Bentonitbarriere
  - AP 1.3: Kolloidgetragener Radionuklidtransport
- AP 2: Modellrechnungen zum kolloidgetragenen RN-Transport (GRS, KIT, FSU)
  - AP 2.1: Benchmarkrechnungen zu thermodynamischen Daten (GRS, KIT, FSU)
  - AP 2.2: Simulationsrechnungen für das CFM Experiment LIT und Mock-Up Tests (GRS)
  - AP 2.3: Simulationsrechnungen für bisherige und weitere CFM Feldexperimente (GRS)
  - AP 2.4: Modellrechnungen/Bewertung des kolloidgetragenen RN Transports (GRS)
- AP 3: Integration der Ergebnisse und Abschlussdokumentation (GRS, KIT, FSU)

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

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

Von dem zweiten vorbehandelten Bentonitstück (Stück B) aus dem aktiven Mock-up-Test wurden die RN-Tracers in gewählten Bentonitschichten analysiert. Ähnlich wie für das schon analysierte Stück A wurde festgestellt, dass 1) die Aktivität von  $^{137}\text{Cs}$  und  $^{241}\text{Am}$  mittels Gamma-spektrometrie nicht nachgewiesen werden konnte; 2) die Konzentrationen von  $^{242}\text{Pu}$ ,  $^{241}\text{Am}$  und  $^{99}\text{Tc}$  unter den Nachweisgrenzen von (SF) ICP-MS lagen und 3) Konzentrationsschwankungen zwischen 0.1 und 1 pg/g für  $^{233}\text{U}$  und zwischen 1 und 10 pg/g für  $^{237}\text{Np}$  sowie für die beiden RN-Tracers ein ziemlich flaches 1.3 cm langes Diffusionsprofil bestimmt wurden. Da anders als bei Stück A, Stück B zwischen einer nicht zerbrochenen Radiotracerampulle und einer inaktiven Ampulle gesammelt wurde, weisen die ähnlichen Diffusionsprofile, die in beiden Stücken (A und B) beobachtet wurden, darauf hin, dass die RN-Tracers nach 5.5 Jahren Versuchsdauer homogen verteilt und im Gleichgewicht mit der Matrix sind.

Weiterhin wurde das Bentonitgel, das als Folge der Erosion außerhalb des Bentonittrings entstanden ist, gesammelt und einer ähnlichen Probenbehandlung und -analyse unterzogen. Die Analyse der Bentonitgel-Proben läuft derzeit. Die Ergebnisse fließen in den Abschlussbericht ein.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

In einem Nachfolge-Vorhaben (EVIDENT) werden weitergehende Experimente durchgeführt. Dazu gehören eine weitere Analyse der LIT-Mock-up- Experimentes und In-situ-LIT “post-mortem” Analysen. Die Radionuklide  $^{242}\text{Pu}$  und  $^{241}\text{Am}$ , die bis jetzt nicht nachgewiesen werden könnten, werden mittels AMS in den Proben von Stück A und B sowie im Bentonitgel bestimmt werden. Wie in dem vorgehenden Zwischenbericht beschrieben wurde, wird zudem die dritte aktive Ampulle gesammelt um den Anteil der Radionuklide zu bewerten, der noch in der Bentonitmischung in der Ampulle sich befindet und nicht durch den Bentonitring diffundiert wurde.

Die in-situ-LIT-Proben werden dann einer ähnlichen Probenvorbereitung wie die Mock-up-Test Proben unterzogen, um Diffusionsprofile zu bestimmen. Als Analysenmethoden kommen Autoradiographie,  $\mu\text{CT}$ , (SF) ICP-MS sowie AMS zum Einsatz.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen (Peer-reviewed publiziert, eingereicht bzw. in Bearbeitung)

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

Zwei weitere Publikationen sind aus den Ergebnissen der „post-mortem“ Analyse des LIT-Mock-up- Experimentes und des In-situ-LIT vorgesehen.

F. Quinto, I. Blechschmidt, T. Faestermann, K. Hain, G. Korschinek, S. Kraft, B. Lanyon, J. Pitters, M. Plaschke, G. Rugel, T. Schäfer, P. Steier, H. Geckeis. Retention and Near-Field Release of  $^{99}\text{Tc}$ ,  $^{233}\text{U}$ ,  $^{237}\text{Np}$ ,  $^{242}\text{Pu}$  and  $^{241}\text{Am}$  from the Long-Term In-Situ Test at the Grimsel Test Site. Presentation at the Plutonium Futures The Science 2022 Conference, September 2022 Avignon (France).

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> 02 E 11759C	
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Grimsel Felslabor: In-situ Experimente zur Bentonit Langzeit-Stabilität und der Radionuklidmobilität an der Grenzfläche Bentonit - Kristallin (KOLLORADO-e3)			
<b>Zuordnung zum FuE-Förderkonzept des BMWi 2021 - 2025:</b> FuE-Feld C2.3 Geotechnische und technische Barrieren; FuE-Feld C3.3 Werkzeuge der Sicherheitsanalysen Relevant für das Wirtsgestein Granit			
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.05.2019 bis 31.12.2022		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2022 bis 31.12.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 316.420,00 EUR		<b>Projektleiter:</b> Dr. U. Noseck	

## 1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

## 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

- AP 1: Experimentelles Programm zum kolloidgetragenen RN-Transport (KIT, FSU)
  - AP 1.1: Radionuklidtransport in kompaktiertem Bentonit
  - AP 1.2: Integrität der Bentonitbarriere
  - AP 1.3: Kolloidgetragener Radionuklidtransport
- AP 2: Modellrechnungen zum kolloidgetragenen RN-Transport (GRS, KIT, FSU)
  - AP 2.1: Benchmarkrechnungen zu thermodynamischen Daten (GRS, KIT, FSU)
  - AP 2.2: Simulationsrechnungen für das CFM Experiment LIT und Mock-Up Tests (GRS)
  - AP 2.3: Simulationsrechnungen für bisherige und weitere CFM Feldexperimente (GRS)
  - AP 2.4: Modellrechnungen/Bewertung des kolloidgetragenen RN Transports (GRS)
- AP 3: Integration der Ergebnisse und Abschlussdokumentation (GRS, KIT, FSU)

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

- AP2: Weiterführung und Abschluss der Modellrechnungen mit PHAST zu den an der FSU durchgeführten Ionenaustauschexperimenten mit vorbehandelten Montmorilloniten aus MX-80 und FEBEX-Bentonit und Mischungen mit Quarz und Ca-haltigen Mineralen (Gips oder Calcit). Ermittlung des Einflusses der Gipsauflösung auf die erwarteten Ionenkonzentrationen in Lösung und Vergleich mit den experimentell bestimmten Werten. Diskussion und Austausch mit den Experimentatoren an der FSU  
Weiterführung von Transportrechnungen zur Diffusion von Radionukliden im Bentonit im Mock-Up Experiment zum LIT und Vergleich der Simulationsergebnisse mit den neuen experimentellen Ergebnissen zu ermittelten Profilen von U, Np und Tc im Bentonitring. Vorstellung der Ergebnisse auf der Konferenz DAEF 2022 – 3rd Conference on Key Topics in Deep Geological Disposal, 4-6. Juli 2022 in Köln.  
Dokumentation der Transportrechnungen zum kolloidgetragenen RN-Transport für ein potenzielles deutsches Endlagersystem und Ableitung von Aussagen zur Bedeutung des kolloidgetragenen Radionuklidtransports für die Langzeitsicherheit eines Endlagers im Kristallingestein.
- AP3: Durchführung von bilateralen Arbeits- und Planungsgesprächen zum Austausch von Ergebnissen und Erstellung der Abschlussdokumentation mit den Partnern von FSU und KIT-INE, sowie Nagra, BGE und BASE.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

- AP3: Durchführung von Arbeitsgespräche mit den Projektpartnern von FSU und KIT-INE und Dokumentation aller durchgeführten Arbeiten und Ergebnisse.

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

Noseck, U., Kouhail, Y., Schäfer, Th., Schneeberger, R., Blechschmidt, I.: (2022): Simulation of radionuclide diffusion profiles in bentonite – prediction for the Long Term In-Situ Test at Grimsel Test Site (GTS), Switzerland, DAEF 2022 – 3rd Conference on Key Topics in Deep Geological Disposal, Cologne, 04-06 July 2022.

<b>Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer:</b> Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e.V., Bautzner Landstr. 400, 01328 Dresden		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11769B</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: MgO-Spritzbeton für Streckenverschlüsse für HAW-Endlager im Steinsalz (MgO-S3), Teilprojekt B		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche (Geotechnische Barriersysteme)		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.05.2019 bis 31.07.2022	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2022 bis 31.07.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 168.309,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Johannes Kulenkampff	

## 1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

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

## 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

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

Im Teilprojekt des HZDR werden im Rahmen der AP 1 und 3 Transportuntersuchungen im Labor in Langzeit-Injektionsexperimenten mit Erfassung durch Positronen-Emissions-Tomographie (PET) und strukturelle Untersuchungen mit  $\mu$ CT vorgenommen.

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

AP4: Abschlussbericht.

<b>Auftragnehmer:</b> Karlsruher Institut für Technologie (KIT) - Kompetenzzentrum für Materialfeuchte, 76128 Karlsruhe		<b>Förderkennzeichen:</b> 02 E 11799A
<b>Vorhabenbezeichnung:</b> Vertikales hydraulisches Dichtsystem nach dem Sandwich-Prinzip – Hauptprojekt. Kurztitel: Sandwich-HP		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> C2.2 Endlagertechnik C2.3 Geotechnische und technische Barrieren, C2.4 Monitoring		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.07.2019 bis 30.06.2023	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2022 bis 31.12.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 3.264.630,82 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Katja Emmerich	

## 1. Vorhabenziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

## 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

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

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

**AP1 und AP2:** Siehe Projektstatusbericht der GRS zu 02 E 11799B.

**AP4:** Die Installation des Sandwichverschlusses im Schacht 2 startete im September mit dem Einbau der Druckkammer und der ersten Hälfte der ERT Elektroden sowie den vertikalen TAUPE TDR an den Schachtwänden. Parallel wurden die DS und ES Materialien geliefert. Die Kissen des Secursol MHP1 (70/30) für DS1 und DS2 sind z.T. während des Transports zerbrochen. Dadurch musste das Material vor der Installation >10 mm gesiebt und das Verhältnis Kissen zu granularem Bentonit (BGM) im binären Gemisch für die Installation der DS1 und DS2 angepasst werden, um die Trockendichten von ca. 1,60 g/cm<sup>3</sup> zu erreichen. Das Verhältnis Kissen zu BGM wurde auch für Calcigel in DS3 und DS4 angepasst. Grund dafür waren die Geometrie sowie die sehr hohen Trockendichten der Kissen des Calcigel. Die Installation des Sandwichverschlusses mit 56 Sensoren (ohne ERT) und einem Glasfasersystem zur axialen Verschiebungsmessung wurde in KW 50 abgeschlossen. Es wurden fünf redundante Sensoren zum Test der kabellosen Datenübertragung installiert. Bis zum Einbau des Widerlagers wird das obere ES gegen Feuchteaufnahme geschützt und beschwert.

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

**AP6:** Die mineralogische Charakterisierung des Opalinus Tons (sandige Fazies) wurde abgeschlossen und die mineralogische Charakterisierung des Secursol MHP1(70/30) sowie des Calcigels für Schacht 2 wurde begonnen. Der HTV-8 wurde rückgebaut und der Wassergehalt bestimmt. Die Installation des HTV-9 mit der Materialfolge wie im Schacht 2 wurde begonnen (siehe Projektstatusbericht TUBAF zu 02 E 11799C). Die MiniSandwich Versuche Oe13 und Oe14 wurden fortgesetzt nachdem der Durchbruch nach 341 bzw. 463 d beobachtet wurde. DS Material für die Versuche Oe15-Oe18 wurde bzgl. des Einbauwassergehaltes konditioniert und die Zellen für den Einbau vorbereitet. Die Versuche sind Wiederholungsversuche zur Bestimmung der Durchbruchzeiten. Die Permeabilität für ein ES Material (N45) wurde bestimmt.

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

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

### 4. Geplante Weiterarbeiten

**AP4:** Einbau Plug und Hydratationssystem Schacht 2 (1. Quartal 2023)

**AP5:** Fortsetzung bzw. Beginn Aufsättigung und Monitoring Sandwichverschlusssystem Schacht 1 und Schacht 2

**AP6** Aufbereitung und chemisch/mineralogische Analyse HTV-8; Start des HTV-9; Fortsetzung MiniSandwichversuche und Quelldruckmessungen

**AP7:** Evaluierung / Bereitstellung Labordaten zur Parametrisierung der ES und DS Materialien

**AP8:** Vorbereitung weiterer Veröffentlichungen

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Emmerich, K. et al. (2022). Large-scale testing of a sandwich shaft seal. 10th Jubilee Mid-European Clay Conference, Kliczków, Poland.

Bakker, E. et al. (2022). Ion transport and cation exchange in semi-technical scale Sandwich sealing system experiments for HLRW disposal. 10th Jubilee Mid-European Clay Conference, Kliczków, Poland.

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> 02 E 11799B	
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Vertikales hydraulisches Dichtsystem nach dem Sandwich-Prinzip – Hauptprojekt. Kurztitel: Sandwich-HP			
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> C2.2 Endlagertechnik C2.3 Geotechnische und technische Barrieren, C2.4 Monitoring			
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.07.2019 bis 30.06.2023		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2022 bis 31.12.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 1.453.730,00 EUR		<b>Projektleiter:</b> Dipl.-Geophys. K. Wieczorek	

## 1. Vorhabenziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

## 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

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

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

**AP1:** Der Testplan für die Installation von Schacht 2 inklusive der kompletten Instrumentierung wurde erstellt und als Mont Terri Technical Note veröffentlicht.

**AP2:** Die allmähliche Aufsättigung des Dichtsystems in Schacht 1 (siehe AP5) führt zu einer Reaktion des Porendrucks und der Spannungssensoren im Nahbereich von Schacht 1 auf der Höhe des untersten Dichtelements. Der Porendruck ist bisher um ca. 0.4 MPa angestiegen, die Radialspannung (bezogen auf Schacht 1) um 0.6 – 0.8 MPa.

**AP4:** Im September 2022 wurde mit der Installation und Instrumentierung von Schacht 2 begonnen (siehe Projektstatusbericht des KIT zu 02 E 11799A).

**AP5:** Im Berichtszeitraum wurde die Aufsättigung des Dichtsystems in Schacht 1 planmäßig und ohne unerwartete Ereignisse fortgesetzt. Der Injektionsdruck beträgt zurzeit ca. 16 bar, die Injektionsrate etwa 0.7 l/d. Inzwischen ist mittels der TDR-, relativen Feuchte- und Porenwasserdruckmessungen nachzuweisen, dass das untere Dichtsegment signifikant aufgesättigt wurde. Radiale Spannungsmessungen zeigen Werte zwischen 1.5 und 2.2 MPa beim unteren Dichtsegment. Die übrigen Dichtsegmente zeigen eine geringe allmähliche Spannungserhöhung und Erhöhung der relativen Feuchte, die auf eine langsame Aufsättigung über das Gebirge zurückzuführen ist.

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

**AP7:** Die Kalibrierung des Bentonitmodells wurde durch Simulation verschiedener im Rahmen des Projekts durchgeführter Quelldruckversuche fortgesetzt und die Entwicklung eines konsistenten Modellparametersatzes fortgesetzt.

**AP8:** Siehe Abschnitt 5.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

**AP2:** Installation weiterer Minipiezometer nahe Schacht 2 (Anfang 2023)

**AP4:** Einbau Plug und Hydratationssystem Schacht 2 (1. Quartal 2023)

**AP5:** Weiterführung bzw. Beginn von Aufsättigung und Monitoring des Verschlussystems in Schacht 1 und Schacht 2

**AP7:** Fortsetzung der Modellkalibrierung und der hydraulisch-mechanischen Simulationen

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Wieczorek, K. et al. (2022). Engineered barriers and the sandwich sealing experiment at Mont Terri. Presentation at Mont Terri 25<sup>th</sup> anniversary, Scientific Symposium, 13 September 2022.

Wieczorek, K. et al. (2022). Shaft sealing by Sandwich seal systems: A large-scale experiment performed at the Mont Terri rock laboratory. Poster at DAEF 2022 – 3rd Conference on Key Topics in Deep Geological Disposal, Cologne, 4 – 6 July 2022.

García-Siñeriz, J.L. et al. (2022). SW-A Experiment: Shaft 1 as-built report. Technical Note TN2020-19, Mont Terri Project, December 2022.

Wieczorek, K. et al. (2022). SW-A Experiment: Test Plan Shaft 2. Technical Note TN2022-61, Mont Terri Project, December 2022.

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

<b>Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer:</b> TU Bergakademie Freiberg, Akademiestr. 6, 09599 Freiberg		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11799C</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Vertikales hydraulisches Dichtsystem nach dem Sandwich-Prinzip – Hauptprojekt (SANDWICH-HP), Teilprojekt C.		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> C2.2 Endlagertechnik C2.3 Geotechnische und technische Barrieren, C2.4 Monitoring		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.09.2020 bis 30.06.2023	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2022 bis 31.12.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 199.115,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. W. Kudla	

## 1. Vorhabenziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

## 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

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

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

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

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

AP6: Der Rückbau des halbtechnischen Versuches HTV-8 wurde abgeschlossen.

Mit dem Einbau des nächsten Versuches HTV-9 wurde begonnen.

AP8: Die Ergebnisse des halbtechnischen Versuches HTV-8 wurden in einem Teilbericht dokumentiert.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

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

AP6: Inbetriebnahme des halbtechnischen Versuches HTV-9

AP8: Zwischenbericht zum Verlauf des halbtechnischen Versuches HTV-9.

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

keine

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> 02 E 11809A	
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Weiterentwicklung von d <sup>3f++</sup> : Hydrogeologische Modellierung im regionalen Maßstab (HYMNE)			
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> C3.1 Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-)Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung, Punkt 1,2,3 FuE-Feld C3.3 Werkzeuge der Sicherheitsanalysen, Punkt 2			
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.07.2019 bis 31.12.2022		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2022 bis 31.12.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 1.175.210,00 EUR		<b>Projektleiterin:</b> A. Schneider	

### 1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

### 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

Folgende Arbeitspakete werden von der GRS bearbeitet:

- AP 1: Erweiterung der Anwendbarkeit
  - AP 1.1 Kalibrierung (Anforderungen, begleitende Arbeiten)
  - AP 1.2 Kopplung mit Vorflutern (Konzept)
  - AP 1.4 Technische Verbesserungen (Konzepte)
- AP 2: Grundwasserbewegung unter Permafrostbedingungen (Konzepte)
- AP 4 Anwendungsrechnungen
  - AP 4.1 Äspö site descriptive model (SDM)
  - AP 4.2 Kraví Hora
  - AP 4.3 INTERFROST
- AP 5 Wartung des Codes (Unterauftrag)
- AP 6 Projektleitung und Dokumentation

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP 1.1 Die Arbeiten wurden abgeschlossen, der Projekt-Abschlussbericht ist in Arbeit.
- AP 1.2 Die Arbeiten am Vorflutermodell wurden abgeschlossen.
- AP 1.4 Die Skripts zur Verknüpfung eines detaillierten Modells mit einem gröber strukturierten Regionalmodell wurden verbessert und an die GRS übergeben.
- AP 2 Vereinfachte Zustandsgleichungen für den Temperaturbereich  $-20\text{ °C}$  bis  $+20\text{ °C}$  und Drücke bis zu 10 MPa wurden entwickelt. Der Bericht GRS-707 über Modellkonzeption und mathematische Grundlagen für die Simulation der Grundwasserströmung unter Permafrostbedingungen befindet sich in der Formalkorrektur zur Veröffentlichung.
- AP 4.1 Das SDM wurde um das Netzwerk an Deformationszonen als niederdimensionale Elemente erweitert. Simulationen wurden durchgeführt zum einen mit den Deformationszonen, zum anderen mit freier Oberfläche.
- AP 4.2 Mit Unterstützung der Programmentwickler wurde das Kravi-Hora-Modell um ortsabhängige Porositäten (ASCII-Raster) vervollständigt. Die Simulationen wurden durchgeführt.
- AP 5 In wöchentlichem Rhythmus fanden online Arbeitsgespräche mit den Programmentwicklern zu Problemen bei den Modellrechnungen AP 4.1 und AP 4.2 und zur Lokalisierung und Behebung von Fehlern statt. Es wurde Unterstützung bei modelltechnischen und numerischen Problemen geleistet.
- AP 6 Am 22.06. wurde ein Online- Projektgespräch mit allen Projektpartnern als Videokonferenz durchgeführt.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- AP 4.1 Auswertung der Simulationsergebnisse für den Abschlussbericht
- AP 4.2 Auswertung der Simulationsergebnisse für den Abschlussbericht
- Erstellung des Abschlussberichtes

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Kröhn, K.-P.: Basics for groundwater flow under permafrost conditions in the context of radioactive storage. FKZ 02 E 11809A (BMW), Report GRS-707, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Braunschweig, 2023. (in Vorbereitung)

Präsentation von Arbeitsergebnissen im Rahmen der Meetings der Task Force on Groundwater Flow and Transport of Solutes im Mai in Kalmar sowie im Oktober (online)

<b>Auftragnehmer:</b> Johann Wolfgang Goethe Universität Frankfurt		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11809B</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Weiterentwicklung von d <sup>3f++</sup> : Hydrogeologische Modellierung im regionalen Maßstab, Teilprojekt B – Kurztitel HYMNE		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> „Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle (2015-2018)“, Februar 2015, Themenbereich 4 „Sicherheitsnachweis“, insbesondere die Forschungs- und Entwicklungsfelder 4.1. Phänomene, Prozesse und Modelle und 4.3 Systemanalysen und Werkzeuge der Sicherheitsanalysen		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2019 bis 30.11.2022	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2022 bis 30.11.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 957.067,00 EUR	<b>Projektleiterin:</b> Dipl.-Math. Babett Lemke	

### 1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

Die Ergebnisse werden zusammen mit den Projektpartnern verwertet. Die große Nutzergemeinde des Simulationssystems UG ist eine ausgezeichnete Plattform zur Verbreitung und Verwertung der Projektergebnisse.

Es erfolgt eine Zusammenarbeit mit der Gesellschaft für Reaktorsicherheit (GRS), Braunschweig, und der Firma TechSim, Kieselbronn, als Unterauftragnehmerin der GRS. Das Verbundprojekt ist ein Folgevorhaben der zwei BMWi-Projekte vom 01.03.2012 – 31.10.2015 (FKZ 02 E 11062) und vom 01.04.2016 – 31.07.2019 (FKZ 02 E 11476).

### 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

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

*AP 1: Erweiterung der Anwendbarkeit (Kalibrierung, Kopplung mit Vorflutern, Zusammenspiel freie Oberfläche – Kluftgestein, Technische Verbesserungen)*

*AP 2: Grundwasserbewegung unter Permafrostbedingungen*

*AP 3.1: Verbesserung der Robustheit der Löser durch hybride AMG-GMG Kombination*

*AP 3.2: Softwareintegration und Neustrukturierung*

*AP 3.3: Entwicklung und Implementierung eines voll-gekoppelten VOF-Verfahrens*

*AP 4: Anwendungsrechnungen (Äspö site descriptive model, Kraví Hora, INTERFROST)*

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

*AP 1: Erweiterung der Anwendbarkeit (Kalibrierung, Kopplung mit Vorflutern, Zusammenspiel freie Oberfläche – Kluftgestein, Technische Verbesserungen)*

Im aktuellen Berichtszeitraum wurde die Kopplung mit einem Vorfluternetzwerk weiter vorangetrieben. Dazu wurde ein neuer Ansatz verfolgt und Impuls und Masse auf einem Fluss-Netzwerk bilanziert. Entsprechend wurden die Saint-Venant-Gleichungen implementiert und in der  $(v,A)$ -Form umgesetzt /HIL23/. Dabei wird das Flussnetzwerk aus 1D-Liniensegmenten zusammengesetzt und in Form einer  $ugx$ -Datei importiert. Das Modell für das Vorfluternetzwerk wurde zudem mit den Berechnungen für das dreidimensionale Grundwassermodell gekoppelt. In einem ersten Schritt wird dabei die Position der gesättigten Grundwasseroberfläche, die anfangs nicht vollständig bekannt ist, als Funktion des Flussnetzwerkes bestimmt. Dazu wird zunächst ein stationärer Zustand der Saint-Venant-Gleichung bestimmt und aus den Pegelständen der Flüsse dann eine Randbedingung für das Grundwassermodell erzeugt. Da die Zeitskalen für die Flüsse kleiner sind als die Skalen für den Transport im Gestein, funktioniert dieser Ansatz gut. Um eine entsprechende Realisierung zu ermöglichen, wurde die Funktionalität von Promesh und UG4 erweitert. Unter anderem kann das Flussnetzwerk auf die Modelloberfläche projiziert werden, zudem können Schnitte der unterschiedlichen Rechengitter erzeugt werden. Entsprechend können Dreiecke und Knoten detektiert und z.B. für die Berechnung der Sollhöhe des Flusses herangezogen werden. Im Hinblick auf eine Verbesserung der Lösungsverfahren kann der Graph des Flussnetzwerkes zur Erzeugung einer Stromabwärtsnummerierung herangezogen werden. Dies beschleunigt die Berechnung mit dem ILU-Verfahren deutlich. Für das entwickelte Modell wurden folgende Testrechnungen durchgeführt: (i) Die Saint-Venant-Gleichungen wurden eindimensional gelöst und die Massenerhaltung anhand einer Verzweigung verifiziert. (ii) Die Kopplung mit der Gesteinsmatrix wurde an einem Quader-Modell mit homogener Permeabilität verifiziert. Dies wurde (iii) für das Cihadlo-Modell mit einer realistischen Geometrie und starkem Permeabilitätskontrast wiederholt.

Da d3f vor allem für die Simulation von Dichte-getriebenen Strömungen implementiert wurde, wurde bei der Anwesenheit der phreatischen Oberfläche immer zusätzlich zum Druckfeld auch die Verteilung des Salzmassenbruchs gespeichert. Bei Problemen, in denen kein Transport von aufgelösten Stoffen betrachtet wird, wie z.B. beim Kravi-Hora-Modell, führte das zu einem übermäßigen Speicherbedarf und einer wesentlichen Verlangsamung der Rechnungen. Daher wurde dafür noch eine zusätzliche Möglichkeit eingeführt, solche Probleme mit der Potenzialströmung zu rechnen, wo nur der Druck als Unbekannte vorkommt. Desweiteren wurde eine Möglichkeit implementiert die Porosität mittels Rasterfiles anzugeben. Für die niederdimensionalen Kanäle wurde eine Option vorgesehen die Breite durch die Zuweisung von Subsets anzugeben.

*AP 2: Grundwasserbewegung unter Permafrostbedingungen*

Die Arbeiten wurden abgeschlossen.

*AP 3.1: Verbesserung der Robustheit der Löser durch hybride AMG-GMG Kombination*

Die Arbeiten wurden abgeschlossen.

*AP 3.2: Softwareintegration und Neustrukturierung*

Die Arbeiten wurden abgeschlossen.

*AP 3.3: Entwicklung und Implementierung eines voll-gekoppelten VOF-Verfahrens*

Die Arbeiten wurden abgeschlossen.

*AP 4: Anwendungsrechnungen (Äspö site descriptive model, Kravi Hora, INTERFROST)*

Da die gemessenen Grundwasserstände und die mit der vorher erzeugten, noch teilweise groben, Geometrie simulierten Grundwasserstände teilweise Abweichungen aufwiesen, wurde die Kravi Hora Geometrie nochmals gründlich verfeinert und weitere Detaildaten hinzugenommen. Mit der neuen Geometrie stimmen experimentelle Daten und Simulationsdaten hervorragend überein.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Die Arbeiten wurden abgeschlossen, da das Projekt am 30.11.2022 endete.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

/HIL23/ Julian L. Hilbert: Modellierung und Simulation eines Flussnetzwerkes über einem porösen Medium. Masterarbeit, Universität Frankfurt, 2023.

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> 02 E 11819	
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> <u>M</u> ineralumwandlung und <u>S</u> orption bei <u>e</u> rhöhten Temperaturen in geklüfteten Kristallingesteinen und Barrierematerial (MUSE)			
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> FuE-Feld C1.3 Methodische Grundlagen eines Standortvergleichs, FuE-Feld C2.3 Geotechnische und technische Barrieren, Punkt 2, 4 FuE-Feld C3.1 Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-)Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung, Punkt 1			
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.08.2019 bis 31.03.2024		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2022 bis 31.12.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 1.930.070,84 EUR		<b>Projektleiterin:</b> Dr. Artur Meleshyn	

### 1. Vorhabenziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

### 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

Bei der Durchführung des Vorhabens werden folgende Arbeitspakete bearbeitet:

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

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

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

AP 4: Dokumentation und Projektleitung

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP 1: Übertragbarkeit der normierten Verteilungskoeffizienten:

Die ICP-OES-, ICP-MS/MS- und TOC-Messungen der Proben Granit-954m vom URL KURT (Südkorea) und Gneis-S8 vom URL Bukov (Tschechien) wurden abgeschlossen. Die Extraktionen mit 0,1 M HCl, Teilaufschlüsse mit 18%tiger HCl und dem Königswasser sowie die Totalaufschlüsse mit der Tetrafluoroborsäure (HBF<sub>4</sub>) sowie die dazugehörigen ICP-MS/MS-Messungen wurden für alle 10 Proben abgeschlossen.

Bei der Durchführung der Versuche bei 80°C wurde eine optimierte Probenahme getestet und realisiert. In den ersten Versuchen mit vier Kernproben wurde die Lösung aus einem Auslaugungsbatch, welches in einem Glasgefäß mit Schraubverschluss ablief, erst nach einer Abkühlung auf die handhabbare Temperatur von etwa 40°C dekantiert. Die Abkühlung kann allerdings zu einer teilweisen Präzipitation/Resorption der ausgelaugten Stoffe führen. Für eine Probenahme ohne vorherige Abkühlung werden nun die isolierenden Einsätze aus den Thermoschüttlern genommen, damit bei der Entnahme der Lösungsproben direkt im Thermoschrank bei 80°C keine Temperaturabnahme in den Batchgefäßen zustande kommt. Die Batches mit den Proben „Kluftfüllung-ZK2-1a“, „Kluftfüllung-ZK2-1b“ vom URL Bukov (Tschechien) wurden durchgeführt. Die Batches mit den Proben „Brekzie-BZXII-J“ und „Kluftfüllung-S8“ vom URL Bukov (Tschechien) wurden für vier der sechs Zeitpunkte durchgeführt.

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

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

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

Die Versuchsreihe aus 30 Versuchen bei 120°C mit den vom IREM RAN an die GRS übergebenen vier Bentoniten wurde für 21 Versuch beendet und ausgewertet, während die letzten 9 Versuche aufgrund des defekten Gaschromatographen noch fortgesetzt werden.

AP 4: Dokumentation und Projektleitung:

Kommunikation mit SÚRAO (Tschechien) und der TU Darmstadt als Unterauftragnehmer.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

AP 1: Abschluss der Auslaugungsversuche mit den Proben „Brekzie-BZXII-J“ und „Kluftfüllung-S8“ vom URL Bukov (Tschechien) und Start der Auslaugungsversuche mit den Proben „Dyke-639m-1“ und „Dyke-639m-2“ vom URL KURT (Südkorea). Durchführung und Auswertung der ICP-MS- und BET-Messungen.

AP 2: Beginn der Versuche mit Kristallinproben vom URL Bukov und URL KURT.

AP 3: Abschluss der Versuchsreihe mit den vier für das russische Endlagerprogramm relevanten Bentoniten.

AP 4: Diskussion der Ergebnisse der Untersuchungen der Kristallinproben aus Tschechien und Südkorea mit den Partnern der TU Darmstadt.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

- keine -

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11829</b>	
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Tonforschung im Felslabor Mont Terri ab Phase 25 (MonTe-25)			
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> FuE-Bereich 2, FuE-Feld 2.2 Charakterisierung des Geosystems, Relevant für das Wirtsgestein Ton			
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.07.2019 bis 30.06.2023		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2022 bis 31.12.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 1.529.410,00 EUR		<b>Projektleiter:</b> Dr.-Ing. Oliver Czaikowski	

## 1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

## 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

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

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

**AP1:** Die GRS verwendet für die Modellierung den FEM-Code CODE\_BRIGHT. Die Modellierungsarbeiten werden simultan zu dem Vorgehen im internationalen Projekt DECOVALEX 2023 mit steigender Komplexität durchgeführt. Begonnen wurde mit einem 2-dimensionalen Model und stufenweisem Aufbau zu einer vollen THM-Kopplung. Des Weiteren wurde die Modellgeometrie auf ein 3-dimensionales Model erweitert, welches aktuell an die Messwerte kalibriert wurde.

**AP2:** Die Messungen wurden fortgeführt, die Messwerte zeigen die Tendenz der Vorjahre. Bei dem Treffen der Experimentpartner im September wurde die weitere Vorgehensweise (Abkühlung und Rückbau) diskutiert. Es wurde festgelegt, dass im 1.Hj. 2023 eine Anbohrung der beiden Abschnitte mit Kernentnahme erfolgen soll, um die aktuellen Sättigungszustände und Dichten vor der Abkühlungsphase festzustellen.

**AP3:** Die Messungen wurden fortgeführt, die Messwerte zeigen eine deutliche Reaktion auf die Streckenerweiterung durch Zunahme der Porendrücke und Temperaturwerte. Daher wurde der Kontakt zum RI-Experiment (Response Investigation, PI Nagra) hergestellt. Nach einer ersten Diskussion mit den Projektpartnern wurde festgelegt, dass das DM-A Experiment relevante Messdaten zur Verfügung stellen wird. Die weitere Vorgehensweise soll auf dem im Januar 2023 stattfindenden TM-40 besprochen werden.

**AP9:** Im CD-A Experiment wird der Einfluss der Bewetterung auf das hydraulisch-mechanische Verhalten des Opalinustons durch Vergleich der Umgebung einer bewetterten und einer abgeschlossenen Nische überwacht, wobei GRS die Porendruckmessungen im Gebirge übernimmt. Unterschiede im Porendruck können auf die unterschiedliche Nischenbewetterung zurückgeführt werden (stärkere Absenkung des Porendrucks im Bereich der offenen Nische, aufgrund der stärkeren Bewetterung über Tunnel und Nische als im Bereich der geschlossenen Nische). Neben den Porendruckmessungen beteiligt sich die GRS an den Modellierungsarbeiten. Gemeinsam mit den Kollegen der BGR wurde eine Modellierungsstrategie ausgearbeitet, um eine Vergleichbarkeit der Ergebnisse zu ermöglichen.

**AP10:** Teilnahme an den Steering Meetings im 2. Hj.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

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

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Posterbeiträge auf der ClayConference 2022



### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP 4: In den früheren Berichtszeiträumen wurde die Wärmeausbreitung im Gesamtendlager-system durchgeführt. Die Berechnungen definierten die Randbedingungen für weitere Teil-nachweise wie beispielsweise der geochemischen Stabilität der geotechnischen Barrieren. Sie sind auch die Grundlagen für weitere gekoppelte Prozessberechnungen wie die thermomechanischen Integritätsberechnungen der geotechnischen Barrieren. Bislang konnte aufgrund des hohen Berechnungsaufwandes in FLAC3D die Berechnung nur bis wenigen tausenden Jahren durchgeführt werden. Um die Entwicklung des Endlagers im Nachweiszeitraum zu analysieren, wurden die thermischen Berechnungen im FE-Code OpenGeoSys durchgeführt. Die Ergebnisse sind in Übereinstimmung mit den FLAC3D-Ergebnissen und decken die Entwicklungsdauer bis 1 Mio Jahre ab. Es zeigt sich eine allmähliche Abkühlung im Endlagersystem über die Zeit. Diese Ergebnisse werden jetzt als Grundlage für weitere thermohydraulische und thermomechanische Analysen zugrunde gelegt.

Im letzten Berichtszeitraum wurde ein Code-Benchmark gestartet, um Unterschieden in den thermischen Ergebnissen kommend aus FLAC3D und PFLOTAN am gleichen Modell zu verstehen. Es wurde vermutet, dass die Porosität des Versatzes in PFLOTAN die thermische Entwicklung im Modell über eine erhöhte Konvektion und über eine Änderung der Wärmekapazität beeinflusst. In den letzten Monaten wurden weitere vertiefende Vergleichsberechnungen an kleineren Modellen durchgeführt, die diese Vermutung bestätigt haben. Es wurde dabei wichtige Erkenntnisse gewonnen, die in die Verbesserung von PFLOTAN geflossen sind. Darauf basierend wurde die thermische Berechnung am Endlagermodell mit PFLOTAN wiederholt. Eine gute Übereinstimmung mit Ergebnissen aus FLAC3D und OpenGeoSys konnte erreicht werden. Dieser Durchbruch markiert das Ende einer einjährigen Fehlersuche und macht es nun möglich, die geplante TH<sup>2</sup>C-Berechnungen für RANGERS in PFLOTAN zu analysieren. Erste Proberechnungen in dieser Hinsicht haben gezeigt, dass die Simulation unter Berücksichtigung von Zweiphasenfluss, Konvektion und Phasenumwandlung in PFLOTAN stabil in vertretbaren Berechnungsdauer läuft. Weitere Testberechnungen sind aktuell im Gange.

Bei BGE TEC wurden die thermo-mechanischen Berechnungen für den Integritätsnachweis des Schachtverschlusses weitergeführt. Die Berechnungen basieren auf einem Endlagergroßes Modell, in der alle Komponente in den Schächten mit hohem Detaillierungsgrad abgebildet werden. Die Einlagerungsbereiche mit den eingelagerten Abfällen werden vereinfacht modelliert und dienen als Wärmequellen. Die Nutzung eines Endlagergroßen Modells erlaubt eine realistische Abschätzung der Einwirkungen im Schachtnahen Bereich durch die Berücksichtigung der natürlichen Kubatur der Schichtenfolge und die realistische Abbildung der Wärmeausbreitung. Erste Ergebnisse liegen vor und werden gerade ausgewertet.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

AP 4: Weiterführung der thermo-mechanischen Berechnungen für den Schachtverschluss. Auswertung der ersten Ergebnisse. Start der Berechnung für den Streckenverschluss gemäß Modellierungskonzept. Der Projektpartner Sandia wird weitere TH<sup>2</sup>C-Proberechnung am RANGERS-Modell durchführen und die PA-Simulationen starten.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Kuhlman, K.; Matteo, E.; Jayne, R.; Mills, M.; Lopez, C.; Hadgu, T.; Fukuyama, D.; Simo, E.; Herold, P.; Keller, A.; Lommerzheim, A; Leon Vargas, P. (2022) RANGERS – Engineered Barrier System, Presentation, 12th US German Workshop on Salt Repository Research, Design and Operation, Braunschweig, 6<sup>th</sup> September, 2022

<b>Zuwendungsempfänger / Auftragnehmer:</b> Helmholtz-Zentrum für Umweltforschung GmbH-UFZ, Permoserstr. 15, 04318 Leipzig		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11850A</b>
<b>Vorhabensbezeichnung / Thema:</b> Verbundprojekt: Deutsch-chinesische Entsorgungsforschung – Pilotprojekt: Reanalysis of BRIUG THM Mock-up Test (ELF-China-Pilot), Teilprojekt A		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Nukleare Entsorgung		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.08.2020 bis 31.08.2022	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2022 bis 31.08.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 65.977,15 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Haibing Shao	

## 1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

## 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

Das Verbundforschungsprojekt besteht aus folgenden Arbeitspaketen (AP):

AP1: Projektmanagement

AP2: Systemanalyse (Modellierung)

AP2.1: TH2M-Prozessmodellentwicklung

AP2.2: RTM-Modellentwicklung (Reactive Transport Processes)

AP3: Experimente

AP4: Synthesis & Education

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

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

#### **Zum AP1 Projektmanagement:**

Im Berichtszeitraum ging es im Projektmanagement vor allem darum, den Abschlussbericht in Form des Buchmanuskripts für die Reihe „Earth System Sciences“ des Springer-Verlags zu koordinieren. Für das kollaborative Schreiben des Manuskripts wurde hierfür eine online Plattform eingerichtet, die es den Autoren ermöglichte, gleichzeitig an den Texten zu arbeiten und den Gesamtfortschritt des Buchmanuskripts zu sehen. Dies ermöglichte eine effiziente Abstimmung bei der Erstellung des Manuskripts sowie der Verknüpfungen zwischen den einzelnen Beiträgen. Aufgabe des Projektmanagement war es, den Rahmen für das Manuskript zu konzipieren und vorzugeben sowie Einleitung und Synthese zu schreiben. Darüber hinaus wurden technische Aspekte in der Manuskripterstellung und des Editierens einschließlich des Korrekturlesens erledigt. Hierfür hat das UFZ Videokonferenzen mit den Projektpartnern organisiert und durchgeführt.

#### **Zum AP2.2 RTM-Modellentwicklung:**

Die abschließende wissenschaftliche Arbeit von Chaofan Chen et al. des RTM-Modells für den Radionuklidtransport in heterogenen Sedimentschichten wurde auf der EGU-Konferenz 2022 vorgestellt. Das Manuskript wurde im peer-review-Verfahren verbessert und bei der Zeitschrift „Advances in Geosciences“ mittlerweile veröffentlicht. Darüber hinaus wurde das Material für den gemeinsamen Abschlussbericht des Vorhabens, der als Buchmanuskript in der Reihe „Earth System Sciences“ des Springer-Verlags geplant ist, aufbereitet. Damit sind die wissenschaftlichen Arbeiten zum AP2.2 RTM-Modellentwicklung abgeschlossen.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Das Buchmanuskript (Shao et al., 2023) befindet sich derzeit in der finalen Phase und wird im April an den Verlag übersendet. Die damit verbundenen Aufgaben, Einarbeiten und Korrekturlesen der Beiträge der chinesischen Partner, finale Formatierung und Einreichung des Manuskripts beim Springer-Verlag übernimmt das UFZ.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Chen, C., Yuan, T., Lu, R., Fischer, C., Kolditz, O. and Shao, H., 2022. The influence of sedimentary heterogeneity on the diffusion of radionuclides in the sandy facies of Opalinus Clay in the field scale, *Advances in Geosciences*, 58 , 77 – 85,

<http://dx.doi.org/10.5194/adgeo-58-77-2022>

Shao, H., Wang, J., Chang, C.-L., Düsterloh, U., Geckeis, H., Nagel, Th., Schäfer, Th., Kolditz, O., Shao, H. (2023): Evaluation of Bentonite Barrier Systems: Experimental and Model Approaches (working title). *SpringerBriefs in Earth System Sciences*, Springer International Publishing, Cham, ISSN 2191-5903

<b>Auftragnehmer:</b> Karlsruher Institut für Technologie (KIT)		<b>Förderkennzeichen:</b> 02 E 11850F	
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt Deutsch-chinesische Entsorgungsforschung – Pilotprojekt: Reanalysis of BRIUG THM Mock-up Test (ELF-China-Pilot), Teilprojekt F			
<b>Zuordnung zum FuE-Förderkonzept des BMWi 2015 - 2018:</b> Nukleare Entsorgung			
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.08.2020 bis 31.08.2022		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2022 bis 31.08.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 10.270,50 EUR		<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Horst Geckeis	

## 1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

## 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

AP1: Projekt Management

AP2: System Analyse (Modellierung)

AP 2.1: TH<sup>2</sup>M Prozesse

AP 2.2: Reaktive Transport Prozesse

AP3: Experimente

AP 3.1: TH<sup>2</sup>M Prozesse

AP 3.2: Reaktive Transport Prozesse

AP 4: Synthese & Ausbildung

AP 4.1: Virtuelles URL Konzept

AP 4.2: Ausbildungs- und Workshop Programm

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

**AP3.2:** In den verbleibenden zwei Monaten des Projekts seit der Abgabe des letzten formalisierten Zwischenberichts für den Zeitraum 01.01.-30.06.2022 bis zum Ende der kostenneutralen Verlängerung laufen die Diffusionsexperimente weiter und es werden Daten gesammelt. Nach wie vor sind die Experimente nicht abgeschlossen und werden weitergeführt. Ähnliches gilt für die Erosionsexperimente, wo die post-mortem Analysen der Proben begonnen wurden.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Der Abschlussbericht für die bislang vorliegenden Daten beider Experimente befindet sich in Arbeit.

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

Keine.

<b>Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer:</b> Johannes Gutenberg-Universität Mainz, Saarstr. 21, 55122 Mainz		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11860A</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen – Phase II (GRaZ II), Teilprojekt A		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Fortentwicklung der Instrumente und Methodik für den Sicherheitsnachweis („Safety Case“) und vertiefte Untersuchungen zu Systemverhalten und -entwicklung sowie zu technischer Machbarkeit und Langzeitverhalten von Endlagerkomponenten		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2020 bis 30.09.2023	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2022 bis 31.12.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 571.271,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Reich	

## 1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

## 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

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

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Für die Untersuchungen des Einflusses von Fe(II) auf die Sorption von Pu(IV) an C-S-H-Phasen wurde die Optimierung der elektrochemischen Zelle (ECC) für die elektrochemische Stabilisierung von Fe(II) fortgesetzt. Dazu wurden verschiedene Membranen getestet, die die Haupt- und Nebenkammer der ECC voneinander trennen. Bei den Experimenten mit einer Polyethersulfonmembran wurden  $^{55/56}\text{Fe}$ -Konzentrationen von  $8 \times 10^{-8}$  mol/L (ACW-VGL, pH 12,5, Carbonsglas-Arbeits Elektrode) und von  $6 \times 10^{-8}$  mol/L (ACW, pH 12,5, Carbonsglas-/Pt-Arbeits Elektrode) verwendet. Im Experiment mit ACW-VGL stellte sich das Gleichgewicht zwischen beiden Kammern nach ca. 25 h ein. Bei weiteren Versuchen konnte schon nach ca. 7 h die gleiche Fe-Konzentration in beiden Kammern der ECC festgestellt werden. Ein großer Nachteil bei der geplanten Verwendung der ECC ist allerdings die starke Sorption von Fe an der Arbeits Elektrode, die zwischen 65 und 92 % der gesamten  $^{55}\text{Fe}$ -Aktivität lag.

In dem Experiment mit einer Anionenaustauschermembran zwischen beiden Kammern konnte die Erwartung bestätigt werden, dass diese Membran eine Diffusion von Fe(II) in die Nebenkammer, in der sich die Pt-Gegenelektrode befindetet, verhindert, wodurch auch kein Fe(III) durch Oxidation an der Elektrode gebildet werden kann.

Da in früheren Batchexperimenten eine deutliche Auslaugung von Fe aus Zementstein (HCP) festgestellt worden war, wurde synthetisches C-S-H (C/S 0,8; 5 g/L) als Sorbens verwendet. Zunächst wurden zwei Sorptionsisothermen von  $^{239}\text{Pu(IV)}$  an C-S-H im Bereich von  $5 \times 10^{-9}$  –  $5 \times 10^{-7}$  mol/L Pu mit Elektrolyten unterschiedlicher Ionenstärke (VGL-C und C-S-H-Porenwasser) aufgenommen, wobei die Kontaktzeit 72 h betrug. Der Vergleich der experimentellen Daten und mit der Literatur ergab, dass die Ionenstärke keinen Einfluss auf die starke Rückhaltung von Pu(IV) durch die C-S-H-Phasen hat. Die Sorption von Pu war  $\geq 99,9$  %. Für die Vorbereitung der Sorptionsstudien von Pu(IV) in Gegenwart von Fe(II) wurde bei den o.a. Batchproben die Fe-Konzentration mittels ICP-MS bestimmt. Die dabei bestimmten Konzentrationen von  $10^{-7}$  bis  $10^{-8}$  mol/L Fe sind nahe beim Löslichkeitslimit von Fe(III) bei pH 10. Deshalb ist es notwendig, zukünftig die C-S-H-Phasen mit größerer Reinheit zu synthetisieren.

Zwei Diffusionsexperimente unter Argon-Atmosphäre mit HCP-Kernen in filterfreien Diffusionszellen konnten abgeschlossen und die Diffusionsprofile von  $^{237}\text{Np(V)}$  ( $c_0 = 8,0 \times 10^{-6}$  M, VGL, pH = 8,2) bzw.  $^{238}\text{Pu(IV)}$  ( $c_0 = 1,0 \times 10^{-9}$  M, ACW-VGL, pH = 12,6) bestimmt werden. Die Eindringtiefe von Np betrug 635  $\mu\text{m}$  innerhalb einer Diffusionszeit von 50 Tagen. Das Pu war innerhalb von 119 Tagen ca. 300  $\mu\text{m}$  in den Zementstein hinein diffundiert. Der Unterschied in den Eindringtiefen wird auf die verschiedenen mobilen Phasen zurückgeführt, da sich in VGL HCP-Phasen (z.B.  $\text{Ca(OH)}_2$ ) teilweise auflösen und damit die Porosität des Zementkerns erhöht wird (s. vorherige Berichte).

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Versuche zur Verringerung der Sorption von Fe an der Arbeits Elektrode der ECC
- Batchexperimente zur Sorption von Fe(II) an C-S-H-Phasen
- Batchexperimente zur Sorption von Pu(IV) an C-S-H-Phasen in VGL-C unter hyperalkalinen und anaeroben Bedingungen in Anwesenheit von Fe(II/III)
- Vorbereitung zweier Zementsteinproben für weitere Diffusionsexperimente mit  $^{237}\text{Np(V)}$  und  $^{238}\text{Pu(IV)}$  in HCP

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

J. Bott, Diffusion von Actiniden in Zementstein, 2022, (Masterarbeit)

C. Sirleaf, Sorptionsuntersuchungen von Eisen(II) in einer elektrochemischen Zelle sowie des binären Systems aus Plutonium(IV) und Zementphasen unter alkalinen bis hyperalkalinen Bedingungen bei hoher Salinität, 2023, (Masterarbeit)

<b>Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer:</b> Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e. V., Bautzner Landstr. 400, 01328 Dresden		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11860B</b>
<b>Vorhabensbeschreibung:</b> Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen (GRaZ II), Teilprojekt B		
<b>Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle</b> Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld: 4.1		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2020 bis 30.09.2023	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2022 bis 31.12.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 426.606,00 €	<b>Projektleiter:</b> Dr. Katja Schmeide	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- Die experimentellen Untersuchungen zur Eu(III)-Komplexierung durch Nitrilotriessigsäure (NTA) wurden abgeschlossen. Durch kombinierte Anwendung von TRLFS und NMR-Spektroskopie konnte das System Eu(III)–NTA über einen weiten pH-Bereich (1 – 13) strukturell und thermodynamisch charakterisiert werden. Dabei wurden Protonierungs-konstanten ( $pK_s$ -Werte) von NTA, die Komplexbildungskonstanten ( $\log \beta$ -Werte) sowie aus zusätzlichen Untersuchungen mittels isothermer Titrationskalorimetrie die thermo-dynamischen Parameter wie  $\Delta H$ ,  $\Delta S$ ,  $\Delta G$  für die Komplexe Eu[NTA] und Eu[NTA]<sub>2</sub> erhalten. Eine weitere TRLFS-Studie im System Eu(III)–NTA ergab, dass die Eu(III)-Speziation durch den 2:1-Komplex dominiert wird. Eine Modellierung der TRLFS-Daten konnte trotz der konkurrierenden Eu-Hydroxidbildung erfolgreich durchgeführt werden.

Die erhaltenen Daten zur Eu(III)–NTA-Komplexierung ermöglichen zukünftig die zuverlässige Beschreibung des ternären Systems (Zementphase–NTA–Eu(III)).

- Die experimentellen Untersuchungen zum Einfluss erhöhter Ionenstärken auf die U(VI)-Retentionseigenschaften von C-A-S-H-Phasen im Vergleich zu C-S-H-Phasen wurden abgeschlossen. Hierfür wurden Proben mit C/S-Verhältnissen von 0,8, 1,2 und 1,6 eingesetzt, die verschiedene Alterationsstadien des Betons repräsentieren, und die jeweils zunehmende A/S-Verhältnisse von 0, 0,06 und 0,18 innerhalb jeder Serie aufweisen. Darüber hinaus wurde die Auswirkung der Temperatur (25 °C, 100 °C, 200 °C) auf die Struktur der C-A-S-H-Phasen und auf den U(VI)-Retentionsmechanismus untersucht. TRLFS-Untersuchungen und Leaching-Experimente mit Porenwässern zeigten eine hohe U(VI)-Retention an den C-S-H- und C-A-S-H-Phasen auch bei erhöhten Ionenstärken.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Der Einfluss von Ca(II) und Al(III) auf die Stabilität der Eu(III)–NTA-Komplexe soll mittels TRLFS sowie (<sup>1</sup>H- und <sup>27</sup>Al-) NMR-Spektroskopie systematisch untersucht werden.
- Die Untersuchungen zur U(VI)- bzw. Eu(III)-Rückhaltung an C-A-S-H-Phasen in Gegenwart von Organika (Gluconat, NTA, PBTC) bzw. bei erhöhten Ionenstärken (Eu(III)/C-A-S-H) werden weitergeführt.
- Veröffentlichung der Ergebnisse zur Eu(III)–NTA-Komplexierung.
- Veröffentlichung der Ergebnisse zum Einfluss erhöhter Ionenstärke auf die U(VI)- Rückhaltung an C-A-S-H-Phasen.
- Veröffentlichung der Ergebnisse zum Einfluss von Gluconat auf die U(VI)-Rückhaltung an C-S-H-Phasen mit einem C/S-Verhältnis von 0,8.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Kretzschmar, J., Stumpf, T.: NMR spectroscopy of selected aqueous systems investigated at HZDR-IRE. Actinides revisited – 2022, 21.-23.09.2022, Dresden, Germany. (Vortrag)

Schmeide, K.: Contribution of bentonite and cementitious material to actinide retention under hyperalkaline conditions and increased ionic strength. DAEF 2022 – 3rd Conference on Key Topics in Deep Geological Disposal – Challenges of a Site Selection Process: Society – Procedures – Safety, 04.-06.07.2022, Köln, Germany. (Poster)

Sieber, C., Kretzschmar, J., Drobot, B., Schmeide, K., Stumpf, T.: Impact of nitrilotriacetic acid on Eu(III) retention by repository relevant solid phases. Jahrestagung der Fachgruppe Nuklearchemie 2022, 04.-06.10.2022, Bergisch Gladbach, Germany. (Poster)

<b>Auftragnehmer:</b> Karlsruher Institut für Technologie (KIT) Institut für Nukleare Entsorgung (INE)		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11860C</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II, (GRaZ II), Teilprojekt C		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Das Vorhaben bezieht sich auf die BMWi-Förderbekanntmachung Nukleare Sicherheits- und Entsorgungsforschung im 7. Energieforschungsprogramm „Innovationen für die Energiewende“ vom 7.1.2019: <ul style="list-style-type: none"> <li>• Fortentwicklung der Instrumente und Methodik für den Sicherheitsnachweis (Safety Case)</li> <li>• vertiefte Untersuchungen zu Systemverhalten und -entwicklung sowie zu technischer Machbarkeit und Langzeitverhalten von Endlagerkomponenten</li> </ul>		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2020 bis 30.09.2023	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2022 bis 31.12.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 411.017,50 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Marcus Altmaier	

## 1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

## 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

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

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

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP 1: (i) Der Einfluss von EDTA auf die Sorption von Eu(III) an CSH-Phasen wurde bei längeren Sorptionszeiten (50 d) fortgesetzt. Die EDTA-Konzentration wurde systematisch im Bereich von  $10^{-5} - 10^{-2}$  m variiert ( $C/S = 1.1$ ,  $I_m = 1.02$  m (NaCl bzw.  $\text{CaCl}_2$ ),  $[\text{Eu(III)}] = 2 \cdot 10^{-8}$  m). Im NaCl- und  $\text{CaCl}_2$  System erfolgte nach 7 Tagen Sorptionszeit und hohen EDTA-Konzentrationen ( $\geq 10^{-2}$  m) eine deutliche Abnahme des  $\log R_d(\text{Eu(III)})$ -Wertes. Nach 50 Tagen erfolgt im NaCl jedoch wieder ein Anstieg auf  $\log R_d = 4 - 5$ . Im  $\text{CaCl}_2$  System bleiben die Werte weiterhin niedrig, um  $\log R_d = 2 \pm 0,5$ . (ii) Komplementäre Cm(III) TRLFS-Untersuchungen zeigen, dass in NaCl die initiale Abnahme des  $\log R_d$  (7 d) mit der Bildung in Lösung zunächst stabiler Cm(III)-Hydrolysespezies korreliert. Nach 50 Tagen Sorptionszeit wird (kinetisch verzögert) die Bildung einer in die CSH-Struktur eingebauten Cm(III)-Spezies beobachtet, sowie ein deutlicher Wiederanstieg der Verteilungskoeffizienten. Im  $\text{CaCl}_2$  System bildet sich initial ein sehr stabiler, ternärer Cm-Ca-EDTA Komplex, welcher auch nach 50 Tagen in Lösung vorliegt und die Sorption von Cm(III) an den CSH-Phasen beeinflusst. (iii) Als Analogie betrachtung wurde mittels EXAFS der zum Cm(III) analoge Am(III)-Ca-EDTA Komplex gemessen.

AP 2: (i) Fortsetzung der Löslichkeitsexperimente (aus Untersättigung) im U(VI)-Silikat System. (ii) Abschluss der TRLFS Analysen im U(VI)-Silikat System. (iii) Thermodynamische Modellierung des (VI)-Silikat Systems. (iv) Start der Erstellung eines Manuskripts zu den TRLFS Analysen im U(VI)-Silikat System. (v) Literaturstudie zu dem System An(IV)-Silikat. (vi) Vorläufige thermodynamische Rechnungen zur An(IV)-Silikat Wechselwirkung unter alkalischen Bedingungen. (vii) Synthese von  $\text{UO}_2(\text{s})$  Festphasen für die Löslichkeitsexperimente in Silikat bzw. Citrat Systemen.

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

AP 4: Es sind hierzu von KIT-INE keine Aktivitäten in frühen Projektphasen geplant.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

AP 1: (i) Untersuchung des Einflusses der Zugabereihenfolge von CSH-Phase, EDTA und Eu(III)/Cm(III) auf die Sorption von An(III) an CSH-Phasen in NaCl- und  $\text{CaCl}_2$ -Lösungen mittels Batch- und TRLFS-Experimenten über einen Zeitraum von  $t > 70$  Tagen. (ii) Untersuchung der Sorption von EDTA an CSH-Phasen mittels  $^{14}\text{C}$ -markiertem EDTA. (iii) Auswertung der EXAFS-Messungen des Am(III)-Ca-EDTA-Komplexes.

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

AP 3: Das monatliche interne Online-Seminar für die Doktorand/innen in GRaZ II wird fortgeführt und entsprechende inhaltliche Beiträge von KIT-INE vorbereitet.

AP 4: Es sind hierzu von KIT-INE keine Aktivitäten in frühen Projektphasen geplant.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine im Berichtszeitraum.

<b>Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer:</b> Universität des Saarlandes Anorganische Festkörperchemie Postfach 15 11 50, 66041 Saarbrücken		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11860D</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen – GRaZ II-Teilprojekt D: Retention, Fixierung und Remobilisierung von endlagerrelevanten Elementen und Elementgemischen an Zementalterationsphasen unter hochsalinaren und hyperalkalinen Bedingungen“		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.01.2021 bis 30.09.2023	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2022 bis 31.12.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 549.256,50 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Kautenburger	

### 1. Vorhabensziele/Bezug zu den anderen Vorhaben

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

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

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

### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP 1: Untersuchungen zur Retention von endlagerrelevanten Elementen bzw. Elementgemischen (WASTE Cocktail) an Korrosionsprodukten von Stahlbeton und Zementalterationsphasen unter dem Einfluss von hochsalinaren und hyperalkalinen Bedingungen
- AP 2: Untersuchungen zur Retention von ausgewählten endlagerrelevanten Elementen bzw. Elementgemischen an Festphasen unter dem Einfluss von Zementzusätzen unter hochsalinaren und hyperalkalinen Bedingungen
- AP 3: Untersuchungen zur Fixierung und Remobilisierung von endlagerrelevanten Elementen bzw. Elementgemischen aus dotierten Festphasen auch unter hochsalinaren und hyperalkalinen Bedingungen
- AP 4: Untersuchung zur Remobilisierungskinetik eingebauter Radionuklide aus dotierten Festphasen durch Konkurrenzreaktionen

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im Untersuchungszeitraum wurden selbst hergestellte C-S-H-Phasen (mit und ohne PBTC-Zusatz), sowie die kommerzielle C-S-H-Phase Circosil 34 Wochen unter atmosphärischen Bedingungen gelagert. Mittels Röntgenbeugung und thermogravimetrischer Analyse gekoppelt mit Infrarotspektroskopie (TG-IR) wurden die Gehalte an Calcit bzw. CO<sub>2</sub> bestimmt. Aus allen drei C-S-H-Phasen entwich über den kompletten untersuchten Temperaturbereich (25-1000 °C) Wasser. Für Circosil konnte im Röntgenbeugungsdiffraktogramm kein Calcit nachgewiesen werden. Die TG-IR-Messung zeigte drei Massenverlustbereiche. Der zweite Massenverlust von 6,8% im Bereich von 360-850 °C kann Wasser und CO<sub>2</sub> zugeordnet werden. Die Ergebnisse für die selbst hergestellte C-S-H-Phasen sind sehr ähnlich. Das Röntgenbeugungsdiffraktogramm der C-S-H-Phase, die während der Herstellung mit PBTC versetzt wurde, beinhaltet Reflexe, die Calcit zugeordnet werden können. Aufgrund des schlechten Signal-zu-Rausch-Verhältnis ist eine eindeutige Zuordnung jedoch nicht möglich. Diese C-S-H-Phase weist mit ca. 30% den größten Massenverlust zwischen 25 und 1000 °C auf. Auch hier lassen sich drei Bereiche unterscheiden, wobei nur im zweiten Massenverlust von 21% (T = 280-850 °C) neben Wasser, CO und CO<sub>2</sub> nachgewiesen werden können. Der erhöhte Anteil an nachgewiesenem CO<sub>2</sub> (und CO) ist auf den organischen Zusatz PBTC zurückzuführen.

Zusätzlich wurde der Einfluss von PBTC auf die Auslaugung der C-S-H-Phasen und die Elemente des Waste Cocktails untersucht. Während pH-Wert und Phosphorkonzentration bei den extra mit PBTC versetzten C-S-H-Phasen vergleichsweise konstant blieben, zeigen die bei der Synthese mit PBTC versetzten Phasen innerhalb des Untersuchungszeitraum eine Auslaugung von PBTC bei gleichzeitigem Absinken des pH-Werts. Komplexierungsstudien von PBTC zeigen eine hohe Tendenz zur Komplexbildung mit Eu(III), Sm(III), und Pd(II). Zr(IV) und Ru(III) weisen im Elementgemisch eine höhere Tendenz zur Komplexbildung auf als im Einzelementversuch. U(VI) wird zu einem geringen Anteil komplexiert, Cs(I) und Mo(IV) bilden keine Komplexe mit PBTC. Bei Zugabe von Fe(II) wird bevorzugt Fe(II) komplexiert. Von den Waste Cocktail Elementen ist nur noch mit Pd(II) eine nennenswerte Komplexbildung mit PBTC zu beobachten.

Ferner wurde die Methode zur Durchführung von Minisäulen-Sorptionsexperimenten (MSE) mittels HPLC weiter ausgebaut. Dabei wurde der Rückhalt von Mo(VI), Pd(II) und Cs(I) im Gemisch an Circosil in 10 mM NaCl untersucht. Es bestätigte sich erneut, dass Mo(VI) kaum an Circosil zurückgehalten wird und die verbaute Säule sehr schnell abgesättigt ist. Für Pd(II) und Cs(I) war hingegen ein sehr hohes Rückhaltevermögen zu erkennen. Dabei betrug der Rückhalt von Pd(II) nach 70-maliger Injektion von 0,25 µg Analyt an 140 mg Circosil noch 100%. Der Rückhalt von Cs(I) verringerte sich auf immerhin noch 89%. Die MSE mit Cs(I) an Circosil wurden weiter vertieft und die Anwendung verschiedener Sorptionsisotherme und Festbetsorptionsmodelle auf die erhaltenen Ergebnisse überprüft. Dabei ergab sich eine maximale Beladungsdichte ( $q_{\max}$ ) von 1,08 mg/g für Cs(I) an Circosil in 10 mM NaCl.

Während diesen MSE wurde stets die ausgelaugten Si(IV)- und Ca(II)-Konzentrationen gemessen. Daraus konnte dann ein einfaches Modell zur Vorhersage der ausgelaugten bzw. gelösten Masse an Circosil in Abhängigkeit zum Eluentenvolumen erarbeitet werden. Demnach wird im Schnitt nach 100 mL Eluent 7% der eingesetzten Masse an Circosil ausgespült bzw. ausgelöst.

Zudem sollte eine HPLC-ICP-MS-Kopplung zur Durchführung von MSE erarbeitet werden. Da das Leaching-Verhalten von Circosil zu diesem Zeitpunkt ein zu hohes Risiko für die ICP-MS bedeuten würde, wurde die Kopplungsmethode mit mehreren Kaolinit-Sand-Gemischen verschiedener Massenzusammensetzung entwickelt. Letztendlich konnte diese erfolgreich mit Eu(III) als Analyt durchgeführt werden und es ergab sich eine  $q_{\max}$  von 0,50 mg/g für Eu(III) an Kaolinit in 10 mM NaCl. Durch Extrapolation der  $q_{\max}$  verschiedener Kaolinit-Sand-Verhältnisse konnte ein  $q_{\max}$  von 0,08 mg/g für Eu(III) an Sand in 10 mM NaCl berechnet werden.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Im nächsten Untersuchungszeitraum werden Batchexperimente im ternären und quaternären System zum Einfluss von PBTC und Fe(II) auf den Rückhalt des erweiterten Waste Cocktails durchgeführt.

Weiterhin soll die auf Kaolinit angewendete Kopplungsmethode zur Durchführung von MSE auf C-S-H-Phasen und auf den gesamten Waste-Cocktail übertragen werden.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Langer, J.J. (2022): „Einfluss von 2-Phosphonobutan-1,2,4-tricarbonsäure und Calcium-Silicat-Hydrat-Phasen auf die Mobilität von endlagerrelevanten Elementen“. Bachelorarbeit, Naturwissenschaftlich-Technische Fakultät, Universität des Saarlandes.

<b>Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer:</b> Technische Universität München		<b>Förderkennzeichen:</b> 02 E 11860E
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen – Phase II (GRaZ II) Teilprojekt E: Quantenmechanische Modellierung der Wechselwirkung von Actinoiden mit Zementphasen und ihren Lösungen		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> FuE-Bereich Sicherheitsnachweis: Phänomene, Prozesse und Modelle		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2020 bis 30.09.2023	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2022 bis 31.12.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 523.530,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> 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; AP2.1: Monosilikatkomplexe; AP 2.2: Oligosilikatkomplexe; AP 3: Unterstützung Experimente.

Modellierungen der Sorption von Fe(II) in der Zwischenschicht von Tobermoritmodellen von CSH-Phasen mit  $C/S = 0.67$  und 1 wurden erweitert. Noch unvollständige Ergebnisse für  $C/S = 1$  ergeben wie für  $C/S = 0.67$  günstige schichtverbrückende Plätze, jedoch ungünstigere kettenverbrückende Plätze. Abweichungen zu EXAFS-Messungen bleiben weiterhin bestehen. Um Austauschenergien von U(VI) durch Fe(II) in CSH-Phasen (AP 1.5) zu bestimmen, wurden frühere Rechnungen zur Sorption von U(VI) in der Zwischenschicht von Tobermorit für  $C/S = 0.67$  und 1 verbessert. Für  $C/S = 0.67$  sorbiert Fe(II) auf allen Plätzen stärker als U(VI). Für  $C/S = 1$  ist dies für schichtverbrückende und monodentate Plätze der Fall, nicht jedoch für kettenverbrückende. Dieser Befund bedarf weiterer Untersuchung.

Um an Experimente des Projektpartners Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf anzuschließen wurde begonnen, die Sorption von U(VI) an Al-Substitutionen in CSH-Phasen zu untersuchen (AP 3). Hierbei wurde von einer verbrückenden Al-Substitution in den Silikatketten eines 14 Å-Tobermoritmodells mit  $C/S = 0.67$  als bekannter Struktur in CASH-Phasen ausgegangen. Für U(VI) auf einem schichtverbrückenden und einem Kantenplatz wurde eine stärkere Bindung an eine Al-Substitution als an eine verbrückende Silikatgruppe errechnet. Weitere Sorptionsplätze sollen untersucht werden.

Der Vergleich der als ähnlich angenommenen Sorption von Th(IV) und U(IV) an CSH-Phasen wurde mit Optimierungen verschiedener Plätze an der solvatisierten (001)-Oberfläche mit  $C/S = 1$  begonnen (AP 1.4). Für Th(IV) wurden die gleichen sorbierten Spezies wie für U(IV) erhalten. Auch relative Bindungsenergien verschiedener Plätze sind sehr ähnlich, mit Ausnahme der Destabilisierung der Sorption an einem sterisch anspruchsvollen kettenverbrückenden Platz. Diese Arbeiten werden auf die Sorption in CSH ausgedehnt und durch dynamische Äquilibrierung vervollständigt, um mögliche abweichende Spezies für Th(IV) zu finden und den Sorptionsmechanismus zu bestimmen.

Untersuchungen zu U(VI)-Silikatkomplexen wurden für weitere Komplexe der Monokieselsäure (AP 2.1) durchgeführt und auf die Dikieselsäure ausgedehnt (AP 2.2). Für den Monosilikatkomplex  $UO_2OSi(OH)_3^+$  wurde die monodentate Koordination bestätigt, da die bidentate Koordination über eine zusätzliche OH-Gruppe weniger stabil ist. Der anionische Komplex  $UO_2(O(Si(OH)_3)_3^-$  zeigt eine schwächere mittlere Bindung der Liganden im Vergleich zum neutralen Komplex mit zwei Liganden. Er bildet sich aus der protonierten Säure stabiler als der Komplex  $UO_2(O_2(Si(OH)_2)(O(Si(OH)_3)^-$ , ist jedoch weniger stabil als dieser wenn man von deprotonierten Liganden ausgeht. Für Deprotonierungsenergien der Dikieselsäure wurden etwas geringere Werte erhalten als für die Monokieselsäure. Für die Dikieselsäure wurden monodentate und zweifach chelatkoordinierte U(VI)-Monosilikatkomplexe betrachtet. Im niederen pH-Bereich (protonierte Säuren) sind die Dikieselsäurekomplexe stabiler als die der Monokieselsäure, im hohen pH-Bereich (deprotonierte Säuren) jedoch nicht. Strukturelle Unterschiede zwischen Mono- und Dikieselsäurekomplexen sind gering.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

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

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

*I. Chiorescu, A. Kremleva, S. Krüger, On the sorption mode of U(IV) at calcium silicate hydrate: A comparison of adsorption, absorption in the interlayer, and incorporation by means of density functional calculations, Minerals 12 (2022) 1541. I. Chiorescu, S. Krüger, N. Rösch, Single-hydroxide bridged dimers of U and Np actinyls: A density functional study on their existence and structure in aqueous solution, Inorganic Chemistry 62 (2023) 830.*

<b>Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer:</b> Universität Potsdam (Physikalische Chemie), Am Neuen Palais 10, 14469 Potsdam		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11860F</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen – Phase II (GRaZ II) – Teilprojekt F: Universität Potsdam		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Die Arbeiten beziehen sich auf den FuE-Bereich 4 „ <i>Sicherheitsnachweis</i> “ mit dem FuE-Feld 4.1 „ <i>Phänomene, Prozesse und Modelle</i> “ des BMWi Förderkonzeptes (2015-2018) „ <i>Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle</i> “		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2020 bis 30.09.2023	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2022 bis 31.12.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 482.418,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> apl. Prof. Dr. Michael U. Kumke	

### 1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

### 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete<sup>2</sup>

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

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

---

<sup>2</sup> Die Nummerierung der Arbeitspakete folgt der im Verbund festgelegten Einteilung.

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

In AP1 wurden die TRLFS-Untersuchungen zu den binären Eu(III)/Ligand- bzw. ternären Eu(III)/Ligand/C-S-H-Porenwasser-Referenzsystemen (Ligand=NTA, Gluconat) bei verschiedenen C/S (0.80 und 1.65) und Ionenstärken ( $[\text{NaCl}] = 0.01 \text{ M}$  und  $2.57 \text{ M}$ ) beendet. Dabei wurde im Porenwasser bei niedrigem C/S die Präzipitation einer neuen Ca-Si-Eu-Mischphase beobachtet, die aktuell durch weitere TRLFS-Experimente und ergänzende Methoden (z.B. SEM, EDX, XRD, ICP-OES) charakterisiert wird. Speziell wurde hier die Eu(III)-Lumineszenzlöschung in der Festphasen durch Variation des Eu(III)-Gehalts und Einsetzen von Gd(III) als zweitem Ln(III) untersucht, wodurch Informationen über die Koordinationsumgebung der Eu(III)-Ionen erhalten wurden. Weiterhin wurde im AP1 begonnen, nach Beendigung der Sorptionsexperimente die C-S-H-Phasen (C/S 0.80 und 1.65) und Überstände mittels SEM, EDX, NMR und ICP-OES zu analysieren, um u.a. die Zusammensetzung des Porenwassers und die  $R_d$ -Werte für die Sorption des Eu(III) und der Liganden (NTA, Gluconat) zu bestimmen. Zudem wurden erste Modellierungen der Sorptionskinetiken mittels PHREEQC begonnen. Ebenfalls im AP1 wurde die Eu(III)-Lumineszenz in Systemen mit Ca-Bentonit- und Montmorillonit-Phasen bei Raum- und ultratiefen Temperaturen zeitaufgelöst bestimmt. Aus diesem Probensatz wurden Systeme mit langer Kontaktzeit ausgewählt, um von den Festphasen nach Filtration und Trocknung Ramanspektren aufzuzeichnen. Die Bildung von Mono- und Polykieselsäuren wurde absorptionsspektroskopisch untersucht mit dem Ziel eine Speziation zur Unterscheidung beider Klassen (AP2). Mittels Transienten-Absorptionsspektroskopie (TAS) wurden Eu(III)-Komplexe zeitaufgelöst untersucht, um ultraschnelle Redox- und oder Elektronenübertragungsprozesse aufzulösen. Darüber hinaus wurden erste Messungen an Gluconat-Systemen durchgeführt. Die Speziation des reinen Liganden wird näher untersucht.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Die Analyse der C-S-H-Phasen und -Überstände aus den Sorptionsexperimenten, insbesondere mittels NMR, ICP-OES und XRD, wird fortgeführt. Mithilfe der daraus gewonnenen Daten zur Porenwasserzusammensetzung usw. sollen anschließend die experimentell ermittelten Eu(III)-Sorptionsskinetiken weiter mit PHREEQC angepasst werden, um die Ratenkonstanten für die Sorptionsprozesse zu erhalten. Weiterhin wird der Einfluss der Zugabereihenfolge von Eu(III) und Ligand auf die Sorption sowie auf die Bildung der Ca-Si-Eu-Mischphase weiter untersucht werden und eine Ausweitung der Desorptionsexperimente auf verschiedene experimentelle Bedingungen (C/S, pH,  $[\text{NaCl}]$ ) erfolgen. Zudem sind Versuche geplant, um die in den Sorptionsexperimenten beobachteten Eu-Gluconat-Komplexe bzw. Eu-Gluconat-Ca-Komplexe zu identifizieren und charakterisieren. Hierfür sollen auch komplementäre Untersuchungen mit anderen Ln(III) (z. B. Sm(III), Nd(III)) mittels TRLFS und TAS durchgeführt werden. Die aufgezeichneten Raman-Spektren aus den Probensätzen zur Eu(III)-Bentonit- bzw. -Montmorillonit-Wechselwirkung werden analysiert werden. Die Untersuchungen der Kieselsäure-Systeme werden erweitert um die Anwesenheit von organischen Liganden, wie z.B. Gluconat oder NTA. Die Arbeiten zur Kombination von TAS und Spektroelektrochemie werden fortgesetzt. Besonders die zeitaufgelöste Betrachtung von Eisen in Kombination mit verschiedenen organischen Liganden wie z.B. Gluconat wird fortgesetzt. Dies wird für U(IV)/U(VI) mittels Transienten Absorptionsspektroskopie ebenfalls durchgeführt.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

- S. Dettmann et al.; Influence of gluconate on the retention of Eu(III), Am(III), Th(IV), Pu(IV), and U(VI) by C-S-H (C/S = 0.8). *Frontiers in Nuclear Engineering*, eingereicht 2022 (ID 1124856).

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Technische Universität Dresden, Helmholtzstr.10, 01069 Dresden		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11860G</b>	
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt G			
<b>Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit</b> Bereich C3: Sicherheitsnachweis, Feld: 3.1			
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2020 bis 30.09.2023		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2022 bis 31.12.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 374.721,00 EUR		<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Stumpf	

### 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

In dem Verbundvorhaben wird die Rückhaltung von Radionukliden an Zementalterationsphasen und Bentonit unter geochemischen Bedingungen, die für die Tonformationen in Norddeutschland relevant sind, untersucht. Ziel ist die Aufklärung des geochemischen Verhaltens von Actiniden an/in Zementalterationsphasen und Bentonit unter dem Einfluss von Fe(II) und niedermolekularer organischer Liganden und Zementadditiven, die Erarbeitung grundlegender Erkenntnisse zur Wechselwirkung von Actiniden mit silikatischen und organischen Liganden bei mittleren bis hohen Ionenstärken und unter hyperalkalinen Bedingungen, die Nachwuchsförderung im Bereich nukleare Entsorgung sowie der Transfer und die Integration der Ergebnisse für einen Sicherheitsnachweis. Die Arbeiten dieses Teilprojektes beschäftigen sich mit dem Einfluss von PBTC (2-Phosphanobutan-1,2,4-tricarboxylsäure) auf die Speziation von Actiniden im System  $\text{SiO}_2$ /(Poly-silikat)-Actinid-Organik unter endlagerrelevanten Bedingungen. PBTC wird in der Herstellung von Zement verwendet und kann während der Betondegradation freigesetzt werden, Es sollen konsistente thermodynamische Standarddaten zur Komplexierung von PBTC mit Actiniden über SIT-Modellierung bestimmt sowie der Einfluss von PBTC auf die Wechselwirkung von Actiniden in silikathaltigen Lösungen charakterisiert werden. Das Projekt liefert einen wichtigen Beitrag für eine thermodynamisch fundierte Langzeitsicherheitsanalyse von nuklearen Endlagern. Das Forschungsvorhaben erfolgt in enger Kooperation mit den Projekten der Universitäten Mainz, Saarbrücken, München, Potsdam und Heidelberg sowie dem Institut für Ressourcenökologie vom Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf und dem Institut für Nukleare Entsorgung vom Karlsruher Institut für Technologie.

### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

*AP-TU1: Untersuchungen zur Wechselwirkung von redoxstabilen Actiniden verschiedener Oxydationsstufen mit PBTC.* Dieses AP beinhaltet die thermodynamische Charakterisierung der Protonierung des PBTC-Liganden, die ausführliche thermodynamische und strukturelle Charakterisierung der Komplexierung der Actinide (u.a. Am(III), Cm(III), Pu(III), Th(IV), U(VI), ggf. inaktive Analoga Eu(III), Nd(III)) mit dem PBTC-Liganden im sauren und alkalischen pH-Bereich als Funktion der Ionenstärke an NaCl und  $\text{CaCl}_2$  sowie Untersuchungen zum Einfluss von Konkurrenzmetallionen (z.B.  $\text{Fe}^{2+}$ ) auf die Komplexierung. Hauptaugenmerk liegt auf der Charakterisierung möglicher ternärer Komplexe. Entsprechende thermodynamische Standarddaten zur Komplexbildung ( $\log_{10} \beta_{n,m}^0$ ,  $\Delta_r H_m^0$ ,  $\epsilon_{j,k}$ ) werden aus SIT-Modellierungen abgeleitet.

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

Geplant sind Batchsorptionsuntersuchungen mit Actiniden in gut charakterisierten (Poly)silicat-Ligand-Suspensionen. Die Sorptionsisothermen und Verteilungskoeffizienten ( $K_d$ -Werte) sollen als Funktion der Ionenstärke (bis 3 m NaCl,  $\text{CaCl}_2$ ) und des pH-Wertes bestimmt werden.

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

**AP-TU1b)** Fortführung der Arbeiten zur spektroskopischen und damit strukturellen Charakterisierung der U(VI)-PBTC-Komplexierung in 0,5 m NaCl. Die Untersuchungen wurden mittels UV-Vis (1), NMR- (2), IR- (3) und Raman-Spektroskopie (4) durchgeführt.

1) Die UV-Vis Untersuchungen wurden in einem einheitlichen Versuchsansatz wiederholt um eine bessere Reproduzierbarkeit der Daten zu gewährleisten. Hierzu wurden pH-Titrationen 2 bis 11 mit verschiedenen U zu PBTC-Verhältnissen durchgeführt. Bei U zu PBTC-Verhältnissen größer  $> 3$  konnten 4 lösliche U(VI)-PBTC-Komplexspezies identifiziert werden mit folgenden Existenzbereichen: Spezies 1  $< \text{pH } 3$ , Spezies 2  $\text{pH } 3\text{-}6$ , Spezies 3  $\text{pH } 7\text{-}9$  und Spezies 4  $\text{pH } > 10$

2) Die weiterführende Interpretation der NMR Daten ergaben das Vorhandensein einer 1:3 U(VI)-PBTC-Komplexspezies bei  $\text{pH } 5$  und höher ( $\text{U:PBTC } > 1:3$ ). Des Weiteren wurden Veränderungen der  $^{31}\text{P}$ -NMR-Signale bei zunehmenden pH-Werten, welche eindeutig dem Komplex zugeordnet werden konnten, weitergehend untersucht. Die vorläufigen Ergebnisse sprechen für eine Änderung der Komplexspezies zwischen  $\text{pH } 6$  und  $8$ .

3) Mit den Untersuchungen des U(VI)-PBTC-Systems mittels IR-Spektroskopie wurde begonnen. Erste Interpretationen der Ergebnisse unterstützen die durch UV-Vis ermittelten Aussagen zur Speziation, sowie die mittels NMR erhaltenen Aussagen zur Anbindung des U(VI) über die Carboxyl- und Phosphonatgruppen des PBTCs

4) Es wurden erste Ramanmessungen an ausgewählten U(VI)-PBTC-Lösungen mit PBTC-Überschuss durchgeführt. Erste und vorläufige Ergebnisse bestätigen die Existenz von 4 U-PBTC-Komplexspezies im pH-Bereich 2-11. Eine deutliche Verschiebung der Ramanschwingung des Uranyls bei  $\sim 870 \text{ cm}^{-2}$  zu kleineren Wellenzahlen wurde detektiert (Spezies 1 ( $\text{pH } 2$ )  $833 \text{ cm}^{-1}$ , Spezies 2 ( $\text{pH } 5$ )  $823 \text{ cm}^{-1}$ , Spezies 3 ( $\text{pH } 8$ )  $811 \text{ cm}^{-1}$ , Spezies 4 ( $\text{pH } 11$ )  $802 \text{ cm}^{-1}$ ) Die deutliche Verschiebung des Ramansignals deutet auf eine starke Komplexierung hin.

5) Technische Probleme mit dem Lasersystem der Cryo-TRLFS ergaben Zweifel an der Belastbarkeit der Ergebnisse auf Grund der geringen spektroskopischen Unterschiede zwischen den Komplexspezies und dem freien Uranyl. TRLFS-Messungen bei RT und verschiedenen Anregungswellenlängen führten nicht zum Erfolg, da PBTC in Anwesenheit von Uranyl und unter Einwirkung von hochenergetischen Laserlicht photochemische Reaktionen (Zerstörung des PBTC und Reduktion des U(VI) zu U(IV)) unterliegt.

6) Weitere Strukturmodelle zur Struktur der U-PBTC-Komplexspezies wurden aus den bisherigen spektroskopischen Untersuchungen erarbeitet. Leider können immer noch nicht eindeutige Zusammensetzungen der Komplexspezies angegeben werden, die eine Bestimmung der thermodynamischen Konstanten ermöglichen.

#### 4. Geplante Weiterarbeiten

1) Fortsetzung der spektroskopischen Charakterisierung der U(VI)-PBTC-Komplexbildung im pH-Bereich zwischen 1 und 12 mittels NMR-, IR- und Raman-Spektroskopie sowie Durchführung von ESI-MS-Messungen zum besseren Verständnis der Struktur der einzelnen Komplexspezies.

2) Wiederholung der TRLFS Untersuchungen des U(VI)-PBTC- System mittels Cryo-TRLFS, Zusammenarbeit mit Projektpartner Prof. M. Kumke, Uni Potsdam.

3) Weiterführende Auswertung der bisherigen der UV-Vis Untersuchungen.

4) DFT-Rechnungen zu den Strukturmodellen der U(VI)-PBTC-Speziation.

5) Bestimmung der thermodynamischen Daten des U(VI)-PBTC-Systems im pH-Bereich von 1 bis 12.

6) Zusammenfassung der Ergebnisse des U(VI)-PBTC-Systems in einem Manuskript zur Veröffentlichung

7) Beginn analoger Untersuchungen im Am(III)/Eu(III)-PBTC-System

#### 5. Berichte, Veröffentlichungen

A. Wollenberg, B. Drobot, M. Acker, S. Taut, T. Stumpf: Complexation of U(VI) with 2-Phosphonobutane-1,2,4-tricarboxylic acid (PBTC) in the pH range of 2 to 10 - A TRLFS investigation of the speciation, Posterbeitrag, GDCh Fachgruppentagung Nuklearchemie, 4.-6.10.2022, Bergisch-Gladbach

<b>Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer:</b> Universität Heidelberg		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11860H</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen (GRaZ II); Teilprojekt H: Spektroskopische Speziation von Ln-/An-Komplexen mit silicatischen und (zement)organischen Liganden		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle: Daten und Instrumente für den Sicherheitsnachweis		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2020 bis 31.05.2025	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2022 bis 31.12.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 403.292,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> 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

Bezüglich des AP 2.3 wurden Untersuchungen durchgeführt, die zum Verständnis der Wechselwirkung von Actiniden mit silicatischen Systemen beitragen sollen. Hierzu wurden zunächst colorimetrische Methoden angewandt, um quantitativ Aussagen über die Polymerisation von Silicaten in wässrigen Systemen mit verschiedenen Hintergrundelektrolyten treffen zu können. Es wurden in einem Zeitraum von 0 – 15 Wochen Systeme mit den Ionenstärken  $I_{\text{CaCl}_2} = 0.4 \text{ M}$  bzw.  $5.0 \text{ M}$  untersucht, die eine Silicatkonzentration von  $c_{\text{SiO}_2} = 3.5 \cdot 10^{-5} \text{ M}$  bis  $3.5 \cdot 10^{-3} \text{ M}$  enthalten, wobei der pH-Wert von 2 bis 10 variiert wurde. Die colorimetrische Methode basiert darauf, dass lediglich mono- und dimere Silicate in saurer Lösung mit Molybdat-Ionen die gelbe Heteropolysäure Molybdatosilicat bilden, welche photometrisch bei  $\lambda = 400 \text{ nm}$  detektiert wird.

Die Ergebnisse dieser Untersuchungen zeigen, dass die Wahl des Hintergrundelektrolyten einen großen Unterschied bei der Polymerisation von Silicaten ausmacht. Bisher wurde die Polymerisation von Silicat im pH-Bereich von 2 – 10 bei Silicatkonzentrationen von  $3.5 \cdot 10^{-5} \text{ M}$  bis  $3.5 \cdot 10^{-3} \text{ M}$  und  $I_{\text{NaCl}} = 0.4 \text{ M}$  bzw.  $5.0 \text{ M}$  untersucht. Im Vergleich dazu begünstigt das bivalente Salz  $\text{CaCl}_2$  die Polymerbildung deutlich stärker bei allen bisher untersuchten pH-Werten im Bereich von 2 - 10 und  $I_{\text{CaCl}_2} = 0.4 \text{ M}$  bzw.  $5.0 \text{ M}$  als das  $\text{NaCl}$ -System, welches im Einklang mit der Literatur ist. Zeitabhängige Untersuchungen der  $\text{CaCl}_2$ -Systeme im Rahmen von 0 – 15 Wochen belegen, dass die Polymerisation bei niedrigeren Ionenstärken und einer Silicatkonzentration von  $c_{\text{SiO}_2} = 3.5 \cdot 10^{-3} \text{ M}$  im pH-Bereich von 3 – 6 langsamer ist als bei höheren Ionenstärken unter denselben Bedingungen.

Mittels zeitaufgelöster Laserfluoreszenzspektroskopie (TRLFS) wurde die Speziation von Cm(III) bei sukzessiver Erhöhung der Si-Konzentration im Bereich  $3.4 \cdot 10^{-5} \text{ M}$  bis  $3.4 \cdot 10^{-3} \text{ M}$  bei konstanter Ionenstärke ( $I_{\text{NaCl}} = 0.4 \text{ M}$ ) und konstantem pH-Wert ( $\text{pH} = 4$  und  $\text{pH} = 5.5$ ) untersucht. Die Ergebnisse zeigen, dass bei niedrigen pH-Werten das Cm-Aquoion dominiert ( $\text{pH} = 4$ ), wohingegen die Speziation bei einem pH-Wert von 5.5 im Wesentlichen durch die Wechselwirkung mit den polymeren Silicatspezies bestimmt wird, was in Übereinstimmung mit vorangegangenen Experimenten ist. Bei der Silicatkonzentration  $c_{\text{SiO}_2} = 3.4 \cdot 10^{-3} \text{ M}$ ,  $\text{pH} = 4$  und  $I_{\text{NaCl}} = 0.4 \text{ M}$  wurde die zeitliche Veränderung der Speziation über einen Zeitraum von 8 Wochen untersucht. Diese kinetischen Studien zeigen, dass die Emissionsbande des Cm-Monosilicatkomplexes bei  $\lambda_{\text{max}} = 598.5 \text{ nm}$  mit zunehmender Zeit abnimmt und nach einem Zeitraum von 8 Wochen nicht mehr zu beobachten ist. Somit ist eine langsame Kinetik für dieses System nachzuweisen. Kinetikuntersuchungen für die Silicatkonzentration  $c_{\text{SiO}_2} = 3.4 \cdot 10^{-3} \text{ M}$ ,  $\text{pH} = 5.5$  und  $I_{\text{NaCl}} = 0.4 \text{ M}$  dauern momentan noch an.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Andauernde kinetische Studien zur Polymerisation von Silikaten in  $\text{CaCl}_2$ -Lösungen
- Kinetik- und Speziationsuntersuchungen zur Wechselwirkung von Cm(III) mit Silicaten bei verschiedenen Ionenstärken
- Experimente zur Komplexbildung von Cm(III) mit organischen Liganden/Carbonaten
- Untersuchung der Wechselwirkung von An(III)/Ln(III) mit polymeren Polycarboxylat-Superplasticizern für pH-Werte  $> 7$

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

-

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> 02 E 11870A
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren - Phase II (UMB II), Teilprojekt A		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren - Phase II (UMB II), Teilprojekt A		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.01.2021 bis 31.12.2023	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2022 bis 31.12.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 963.287,72 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Artur Meleshyn	

### 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Zum Erreichen der oben genannten Ziele sind aufeinander abgestimmte experimentelle und analytische Arbeiten in den Laboren der Verbundprojektpartner sowie quantenchemische Modellierungen und geochemische Modellierung vorgesehen. Im AP 1 „Zersetzung von Karbonaten und CO<sub>2</sub>-Freisetzung“ (Federführung: GRS) sollen dafür im GRS-Labor Versuche mit Bentoniten, reinen Mineralphasen und aus diesen hergestellten Mineralgemischen in Metallzylindern bei 120°C sowie anschließende Gasanalysen und Bestimmungen der Karbonatgehalte, pH-Werte und Zusammensetzungen der Kontaktlösungen durchgeführt werden. Die Versuche und ihre Auswertung sollen durch die unterstützende geochemische Modellierung begleitet werden. Im AP 6 koordiniert die GRS die Arbeiten im Verbundprojekt.

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

Im Berichtszeitraum wurde die Versuchsreihe zur Ermittlung der reaktiven Mineralphasen durchgeführt und ausgewertet. Sie bestand aus 10 Gemischen, die aus Kalzit und einer bis zwei weiteren Mineralphasen, wie Smektit, Phlogopit, Quarz, Pyrit und Gips zusammengesetzt wurden. Die Versuchsreihe wurde durch die Analysen der freigesetzten Gase und des Kohlenstoffgehaltes begleitet. Die Auswertung der erhaltenen Daten hat Smektit/Quarz und Pyrit/Quarz als reaktive Mineralphasen, die die Zersetzung des Kalzits begünstigen, identifiziert. Eine weitere Versuchsreihe, die die Reproduzierbarkeit der verwendeten Methode und die Zersetzung des Kalzits in Bentonit durch die Zugabe von Pyrit untersucht, wurde gestartet. In der Versuchsreihe zur Herstellung der Bentonitproben für Beamline-Computertomographie wurde die letzte Probe an die LUH-IfBK übergeben. Eine Abstimmung der Versuchsdurchführung im AP1 erfolgte mit der UG und LUH-IfBK.

Die Koordination des Verbundprojektes bestand in der Organisation des vierten Präsenzworkshops, welches am 26. Oktober 2022 durch die GRS in Braunschweig ausgerichtet wurde.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

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

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

Keine

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e. V., Bautzner Landstr. 400, 01328 Dresden		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11870B</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt B		
<b>Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit</b> Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte, Feld: 2.3		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.01.2021 bis 31.12.2023	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2022 bis 31.12.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 359.046,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> 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 CO<sub>2</sub>-Gasbildung durch eine teilweise bis vollständige Zersetzung der in Bentoniten vorhandenen Carbonate ablaufen kann. Im Projekt UMB-II sollen die beteiligten Reaktionsmechanismen aufgeklärt werden. Weitere Arbeitsschwerpunkte sind (i) die Abhängigkeit der Lösungsrate der Smektitite vom Bentonit-Typ, (ii) der Einfluss der Fe(II)/Fe(III)-Redoxreaktion (experimenteller und quantenchemischer Ansatz), (iii) die Unterschiede in Korrosionsraten und –produkten an einer Eisen-Bentonit-Grenzfläche (mit Einsatz einer zu optimierenden Mössbauerspektroskopie) und (iv) der Einfluss der Bentonit-eigenen mikrobiellen Population.

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

### Beziehung zu anderen Vorhaben

Innerhalb der Kooperationspartner (Förderkennzeichen 02E11870)

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

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

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

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

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

Nach 350 Tagen Inkubation wurden die Mikrokosmen ein drittes Mal beprobt. Erstmals wurde auch die Gasphase analysiert sowie die Anwesenheit von Sulfiden in Lösung. B27-Ansätze, welche bei 37°C in Anwesenheit von Wasserstoff und GGG40 inkubierten, zeigten die Bildung von Sulfiden in Lösung und in der Gasphase. In den entsprechenden Ansätzen verringerten sich zudem die Wasserstoff- und Sulfat-Konzentration. Diese Beobachtungen deuten auf die Aktivität von Sulfat-reduzierenden Bakterien hin (SRB), welche in den jeweiligen Mikrokosmen auch nachgewiesen werden konnten und die Population dominierten. Die identifizierten SRB *Thermincola*, *Desulfallas-Sporotomaculum* und *Desulfotomaculum* sind strikt anaerobe, sporenbildende SRB, welche Wasserstoff als Elektronen-Donor nutzen können um Sulfat und/oder Eisen zu reduzieren. Entsprechende Ansätze, welche bei 70°C inkubierten sowie die sterilen Kontrollen blieben mikrobiell unauffällig. Bisher konnte noch bei keinem der GMZ-Mikrokosmen eine signifikante mikrobielle Aktivität identifiziert werden. Alle Ansätze blieben diesbezüglich unauffällig.

Unabhängig vom Bentonit, zeigen alle Mikrokosmen, in denen sich GGG40 Plättchen befinden, einen erhöhten Druck in der Gasatmosphäre und eine beschleunigte Freisetzung von Fe(II) in Lösung. Diese Beobachtungen waren besonders deutlich, wenn die Ansätze bei 70°C inkubiert wurden. CLSM-Analysen der Universität Hannover zeigen eine deutlich beschädigtere Oberfläche der GGG40-Plättchen, wenn diese bei 70°C inkubiert wurden. Ein mikrobieller Einfluss konnte hier bisher nicht festgestellt werden.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Im fünften Berichtszeitraum des UMB-II Projektes soll die vierte Beprobung nach insgesamt etwa 600 Tagen Inkubation erfolgen. Im Fokus stehen dann die Bestimmung der mikrobiellen Diversität ausgesuchter Proben sowie Korrosionsanalysen der GGG40 Plättchen mit Hilfe von SEM-EDX. Zudem sind weitere Analysen zur Oberflächenrauigkeit der GGG40-Plättchen geplant (in Zusammenarbeit mit der Universität Hannover).

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

#### Publikationen:

Bisher keine

#### Vorträge:

*Matschiavelli, N.*, **Microbial Influence on Cast Iron Corrosion under Repository-Relevant Conditions**; 4th project meeting UMB-II, GRS Braunschweig, 26.10.2022.

*Matschiavelli, N.*, **Mikrobiologie am HZDR – Welche Rolle spielen Mikroorganismen bei der Endlagerung von hoch-radioaktivem Müll?** Tag der Wissenschaften am Beruflichen Schulzentrum für Gastgewerbe in Dresden, 24.11.2022.

#### Poster:

*Sushko, V., Dressler, M., Wei, T., Neubert, T., Kühn, L., Cherkouk, A., Matschiavelli, N.*, **The microbial inventory of bentonite – how does it affect the long-term integrity of repository for high-level radioactive waste?** ISME-microbes 2022, Lausanne, 18.08.2022.

<b>Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer:</b> Universität Greifswald, Domstr. 11, 17489 Greifswald		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11870C</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren- Phase II (UMB II), Teilprojekt C		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle</b> Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld: 4.1, Wirtsgestein: Salz + Ton		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.01.2021 bis 31.12.2023	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2022 bis 31.12.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 244.830,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> 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 CO<sub>2</sub>-Freisetzung (AP2), pH Änderung und zum Redoxzustand (AP2) bestimmt. Änderungen der Smektitzusammensetzung werden auch in Bezug auf mikrobielle Aktivität (AP4) sowie der Korrosion des Fe-Metallkanisters (AP5) untersucht.

## 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

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

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

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

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

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

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

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

AP-Nr. 3.8: "Berichte"

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Die zweite Runde der Batch-Reaktor-Experimente, die Teil des AP-Nr. 3.2 wurde abgeschlossen und Proben zur Analyse entnommen. Die Ergebnisse der mineralogischen und geochemischen Untersuchungen durch XRD und EDX-SEM zeigen, dass der Grad der Smektit-Umwandlung von der Art der verwendeten Begleitminerale abhängt, wobei die meisten Veränderungen in Gegenwart der organischen Säure (K-Oxalat) auftreten. Dies scheint eher auf die erhöhte Aktivität von  $K^+$  in den Lösungen als auf pH-Unterschiede zurückzuführen zu sein, obwohl unklar bleibt, ob das Oxalat als Katalysator wirkt, indem es mehr Aluminium komplexiert: ein Mechanismus, der in der Literatur vorgeschlagen wird. Ein erheblicher Teil des Smektit wurde in ein 2:1-glimmeriges Tonmineral mit Zusammensetzung die einem Seledonit ähnlich ist umgewandelt, und komplexe Wechsellagerungen beinhaltet, die derzeit modelliert werden. Diese zweite Versuchsrunde, welche eine niedrigere Konzentration an K-Oxalat verwendeten als die erste Reihe, wurde verglichen. Ein Plan für die nächste Reihe von Experimenten umfasst einen Satz mit K-Oxalat unter statischen Bedingungen und einen weiteren Satz mit KCl unter Verwendung einer Rotationsgeschwindigkeit von 20 U/min bei 180 °C. Das letztere Experiment dient dazu, jegliche katalytische Wirkung zu isolieren, die unabhängig von der Aktivität von  $K^+$  sein könnte.

Zusätzlich zu den reinen Smektit (=Montmorillonit) (Charge 1 und 2) wurden Experimente mit Fe-reichen Smektit (einem Nontronit aus Hedemünden) unter Verwendung der gleichen Parameter wie die oben beschriebenen zweite Charge durchgeführt. Ähnlich wie Smektit (Montmorillonit) zeigte auch der gereinigte Nontronit bei Behandlung mit K-Oxalat einen hohen Grad an Veränderung, besonders Wechsellagerungen von Seledonit-Smektit. Diese neu ausgefällten Wechsellagerungsminerale zeigen eine interessante Bandbreite an Strukturen mit Ordnungsgraden.

Für die GRS wurden zusätzliche Proben mit ähnlichen Mineralmischungen hergestellt und werden derzeit mittels XRD analysiert. Die Ergebnisse werden während des 4. UMB-II-Workshops diskutiert. Allerdings haben bei der GRS und unserer Arbeitsgruppe Verzögerungen aufgrund der Pandemie und Probleme bei der Suche nach technischem Ersatzpersonal für die Elektronenmikroskopie zu weiteren analytischen Einschränkungen geführt, was zu einer Verzögerung von insgesamt 10 Monaten im geplanten Zeitplan geführt hat.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Nach Abschluss des dritten Batch-Experiments im Januar 2023 werden mineralogische und geochemische Analysen, (XRD, EDX-SEM und TEM,) an diesen Proben durchgeführt. Daran schließen sich zwei weitere Batch-Experimente an, die bei zwei unterschiedlichen Temperaturen über jeweils 4 Monate inklusive Vorbereitung, Experiment und Analysen durchgeführt werden. Darüber hinaus bereiten wir weitere Proben für die nächsten GRS geplanten Batch-Experimente mit Mikronisierung, Herstellung der Mischungen und anschließenden XRD-Messungen vor. Im Hinblick auf unseren Zeitplan werden wir die 10 Monate nicht aufholen können, um alle Projektziele zu erreichen. Dies wird nur möglich mit einer Verlängerung der Projektaktivitäten.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

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

Sudheer Kumar, R.; Podlech, C.; Warr, L.N.; Grathoff, G.; Svensson, D. (2022). Mineral alterations in buffer materials from the 5th “hot bentonite” experiment in the Äspö Hard Rock Laboratory, Sweden. Mid European Clay Conference, Kliczkow – Poland 11-15 September 2022.

Schlosser, J.; Grathoff, G.H.; Kaufhold, S.; Dietel, J.; Schleicher, A.; Warr, L.N. (2022). Stability of smectite at 200°C: How KCl, K-acetate and K-oxalate influences the formation of 10 Å-layers. AIPEA - XVII International Clay Conference, Istanbul – Turkey 25-29 July 2022.

Manzel, T.; Podlech, C.; Warr, L. & Kaufhold, S. (2022). In situ measurements of the hydration behavior of compacted Milos (SD80) Bentonite by wet-cell X-Ray diffraction. Mid European Clay Conference, Kliczkow – Poland 11-15 September 2022.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Technische Universität München, Arcisstr. 21, 80333 München		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11870D</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt D		
<b>Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit</b> Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte, Feld: 2.3		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.01.2021 bis 31.12.2023		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2022 bis 31..2022
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 302.335,00 EUR		<b>Projektleiter:</b> Dr. Krüger

### 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Das Untersuchungsprogramm umfasst folgende Arbeitspakete (AP):

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

Die zentralen Themen des Projektes sind die rechnerische Modellierung von Fe(II)-Substitutionen in Smektiten (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 Zwischen-schichtionen, 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

Modellierungen zu oktaedrischen Eisensubstitutionen in Smektiten wurden für cis-vakanten Pyrophyllit und Montmorillonit fortgeführt und auf ein entsprechendes Beidellit-Modell ausgedehnt (AP 2). Für zwei Eisensubstitutionen in Pyrophyllit (Fe(II) oder Fe(III)) sowie eine Substitution in Montmorillonit konnte das Problem der Anordnung ladungskompensierender  $\text{Na}^+$ -Ionen weitgehend gelöst werden, so dass bezüglich dieses Freiheitsgrades konsistente Daten erhalten wurden. Lediglich bei direkt benachbarten Substitutionen ist damit noch ein Vergleich verschiedener Anordnungen notwendig. Bisherige Ergebnisse ergaben, dass Fe(II) zwei verschiedene oktaedrische Konfigurationen im Gitter einnehmen kann, die sich strukturell kaum und in der Energie um  $13 \pm 0.5$  kJ/mol unterscheiden. Diese Strukturvarianten werden unabhängig vom Mineral und anderen Substitutionen zufällig erhalten. Exemplarische dynamische Simulationen deuten darauf hin, dass die Strukturen höherer Energie bei Raumtemperatur metastabil sind. Der konstante Energieunterschied beider Strukturvarianten erlaubt eine Abschätzung der Energie der stabileren Struktur für Anordnungen der Substitutionen, für die nur die weniger stabile Struktur erhalten wurde. Damit ist eine Abschätzung der Variation der relativen Stabilität und der relativen Redoxpotentiale in Abhängigkeit der Verteilung der Substitutionen möglich. Für die Variation des Redoxpotentials Fe(II)/Fe(III) ergaben sich mit diesem Ansatz in Pyrophyllit mit einer zusätzlichen Fe(III)-Substitution 80 mV und in Abhängigkeit einer zusätzlichen Fe(II)-Substitution 260 mV. In Montmorillonit variiert das Eisenredoxpotential um bis zu 340 mV in Abhängigkeit vom Abstand einer Mg(II)-Substitution. Diese Ergebnisse werden derzeit überprüft, nachdem eine Methode gefunden wurde, um gezielt die stabilere Konfiguration der Fe(II)-Substitutionen zu erhalten (AP 1).

Die Untersuchung der Energievariation von Eisensubstitutionen in Smektiten wurde weiterhin unter Verwendung analoger Modelle auf cis-vakanten Beidellit mit  $\text{Na}^+$ -Gegenionen ausgedehnt (AP 2). Das  $\text{Na}^+$ -Gegenion der tetraedrischen Al(III)-Substitution in Beidellit zeigt eine Energievariation von 10 kJ/mol für Positionen in benachbarten quasi-hexagonalen Ringen der Tetraederschicht um die Al(III)-Substitution. Damit ist seine Position relevant für die Bestimmung genauer Eisenredoxpotentiale. Für oktaedrische Fe(III)-Substitutionen konnte die bereits aus dem Vorgängerprojekt bekannte geringe Variation der Energie mit dem Abstand der Substitutionen bestätigt werden, wobei ein Platz nahe der tetraedrischen Substitution bevorzugt ist. Fe(II)-Substitutionen in Beidellit zeigen eine aufgrund der Struktur erwartbare etwas unregelmäßige Energievariation mit dem Abstand zur tetraedrischen Substitution. Positionen nahe der tetraedrischen Substitution sind ungünstig und die bevorzugten sind nicht die entferntesten. Die Variation der Energie von Fe(II) in der Oktaederschicht für verschiedene Plätze fällt mit etwa 30 kJ/mol etwas geringer als im Montmorillonit aus. Bisher sind etwa die Hälfte möglicher Substitutionsanordnungen untersucht. Für die Variation des Redoxpotentials von oktaedrischem Eisen ergibt sich daraus ein vorläufiger Wert von 400 mV. Dieser Wert ist höher als für Montmorillonit und auf die Unterschiede bevorzugter Plätze beider Eisenoxidationsstufen in Montmorillonit und Beidellit zurückzuführen.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

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

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<b>Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer:</b> Leibniz Universität Hannover, Welfengarten 1, 30167 Hannover		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11870E</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren II – Phase II (UMB II), Teilprojekt E		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle</b> Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte, Feld: 2.3		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.01.2021 bis 31.12.2023	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2022 bis 31.12.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 228.860,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Renz	

## 1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Bentonit-basierte Nahfeldbarrieren können in einem Endlager für hoch-radioaktive Abfälle aufgrund erhöhter Temperaturen und einer Wechselwirkung mit wässrigen Lösungen aus dem umliegenden Wirtsgestein eine für die Langzeitsicherheit des Endlagers relevante Umwandlung erfahren. Im Projekt UMB wurde festgestellt, dass bei 25, 90 und 120°C eine erhebliche pH-Absenkung sowie eine CO<sub>2</sub>- Gasbildung durch eine teilweise bis vollständige Zersetzung der in Bentoniten vorhandenen Karbonate ablaufen kann. Im Projekt UMB-II sollen die beteiligten Reaktionsmechanismen aufgeklärt werden. Weitere Arbeitsschwerpunkte sind (i) die Abhängigkeit der Lösungsrate der Smektite vom Bentonit-Typ, (ii) der Einfluss der Fe(II)/Fe(III)-Redoxreaktion (experimenteller und quantenchemischer Ansatz), (iii) die Unterschiede in Korrosionsraten und –produkten an einer Eisen-Bentonit-Grenzfläche (mit Einsatz einer zu optimierenden Mößbauerspektroskopie) und (iv) der Einfluss der Bentonit-eigenen mikrobiellen Population.

## 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

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

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

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

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP1 & AP2: Die durchgeführten Analysen ermöglichen die Quantifizierung des Einflusses von Temperatur und Wassergehalt der Bentonite auf den Korrosionsfortschritt. Die Ergebnisse dienen der Verifikation der zuvor von anderen Projektteilnehmern gewonnene Erkenntnisse (geringer Einfluss von H<sub>2</sub>O auf Reaktionsfortschritt & Abnahme der Reaktionsrate bei höheren Temperaturen). Durch Vergleichsmessungen von Referenzproben wurde die Messmethode erfolgreich validiert und auf Plausibilität getestet. Des Weiteren wurde der Aufbau einer Messanlage für Messungen bei tiefen Temperaturen erfolgreich begonnen.
- AP3: Die Verstärkerschaltung und -auslesung der Detektoransteuerung wurde erfolgreich weiterentwickelt. Ziel ist die Erstellung mehrerer Schaltungen unter Nutzung der Programme LT-Spice und MATLAB zur simulativen Erweiterung der Schaltung. Bei der Planung einer ersten möglichen Schaltung erzielt die Transimpedanzverstärkerschaltung simulativ gute Ergebnisse und ist bereit in Hardware umgesetzt zu werden. Die simulative Schaltungsanalyse einschließlich Stabilitätsbetrachtung und Filtererweiterung erfolgte und zeigt vielversprechende Ergebnisse.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1 & AP2: Es werden weitere Messungen für die Projektteilnehmer durchgeführt. Darüber hinaus ist die Inbetriebnahme des Tieftemperatur-Aufbaus geplant. Ziel ist die Optimierung des Signal/Rausch-Verhältnisses um kompliziertere Analysen, wie eine Unterscheidung von Fe(II)/Fe(III) in unterschiedlichen Koordinationsumgebungen, zu ermöglichen und so die Analyse unterschiedlicher Phasen signifikant zu verbessern.
- AP3: Es sind weitere Optimierungen im Bereich der Detektorelektronik sowie der Auswerteeinheit geplant. Die Transimpedanzverstärkerschaltung wird in Hardware umgesetzt und vermessen. Die entwickelte Simulation wird um einen Zustandsregler und Zustandsbeobachter erweitert und sowohl simulativ als auch in emulierter Form getestet und eingesetzt. Dies dient der Rauschreduktion in der Datenvorverarbeitung der Signale. Zudem erfolgt somit eine Anpassung der elektronischen Bauteile des Mößbauer-Spektrometers an aktuelle Bauteilproduktionen. Etliche vorher verwendete Bauteile werden nicht mehr hergestellt und müssen daher unter Qualitätserhaltung substituierbar sein. Somit muss eine Neuentwicklung der Verstärkerplatine erfolgen. Des Weiteren wird die Software der Auswerteeinheit optimiert, um eine schnellere Detektion einzelner Photonenereignisse und somit höhere Countraten zu ermöglichen. Die Signalvorverarbeitung spielt an dieser Stelle eine entscheidende Rolle. Zusätzlich soll das Konzept der zweidimensionalen Datenaufnahme weiter ausgebaut und auf mehrere Detektoren ausgeweitet werden.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

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

<b>Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer:</b> Institut für Bodenkunde, Leibniz Universität Hannover		<b>Förderkennzeichen:</b> 02 E 11870F
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt F		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Förderkonzept des Bundesministeriums für Wirtschaft und Energie (BMWi): Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.01.2021 bis 31.12.2023	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2022 bis 31.12.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 254.261,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> 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 CO<sub>2</sub>-Freisetzung, Entstehung von Acidität und Mechanismen der Protonenpufferung, Metallkorrosion in Kontakt mit Bentoniten und die Bedeutung der Adsorption von Fe an Kantenflächen der Tonminerale für deren Löslichkeit untersucht.

### 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

AP1: Auflösung von Carbonaten und CO<sub>2</sub>-Freisetzung  
 AP2: Acidität der Bentonite bei erhöhten Temperaturen  
 AP3: Lösungs- und Umwandlungsmechanismus der Smektite in Bentoniten  
 AP4: Metallkorrosion in Bentoniten mit/ohne mikrobiellen Einfluss  
 AP5: Fe(II)/Fe(III)-Redoxreaktion auf atomarem Niveau

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1: Die von der GRS erhaltene Probenreihe zu Umwandlungsreaktionen in zwei Bentoniten durch Carbonate sowie Fe(II) und S enthaltende Minerale wurden Ende Oktober in *ex situ* Messungen tomographisch am DESY in Hamburg untersucht. Zusätzlich wurden vier weitere Bentonite einbezogen, wo der Reaktionsfortschritt durch Zusatz des Oxidationsmittels H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> eingestellt wurde. Erste Analysen der tomographischen Lagen zeigen, dass die beteiligten Mineralphasen detektiert und hinsichtlich ihres Umsatzes beschrieben werden können. Für die vorgesehenen *in situ* Messungen zur Verfolgung des Reaktionsumsatzes einzelner Mineralpartikel und von Gasbildung wurde im September ein Antrag auf Messzeiten am DESY gestellt. Dieser wurde zum Jahreswechsel im Umfang von 5,75 Shifts a 8 h bewilligt. Versuche zur *in situ* CO<sub>2</sub> Freisetzung aus Bentoniten in einer p/T Zelle wurden weitergeführt. Dabei wurde festgestellt, dass auch CaCO<sub>3</sub>-freie Tone CO<sub>2</sub> freisetzen können. Dies ist vermutlich auf sorbiertes CO<sub>2</sub> an Mineraloberflächen zurückzuführen. Um freigesetztes CO<sub>2</sub> über die IR-Absorbanz hinausgehend zu quantifizieren, wurden Bestimmungen am Gaschromatographen vorbereitet.

AP2: Das für Versauerungsreaktionen wirksame Fe(II) liegt in Bentoniten sowohl in Tonmineralen als auch Schwermineralen vor. Zur Kennzeichnung der beiden Pools an Fe(II) wurden die Schwerminerale von 8 Tonen mittels einer auf Dichte  $2,9 \text{ g cm}^{-3}$  eingestellten Na-Polywolframatlösung abgetrennt. Der Anteil an Schwermineralen lag dabei immer unter 1 %, wobei der Anteil ferromagnetischer Schwerminerale wie Magnetit an dieser Fraktion  $< 50 \%$  war. Elektronenmikroskopisch sind für die Schwerminerale Auflösungs- bzw. Umwandlungserscheinungen feststellbar. Die eingehende Korngrößenanalyse der Tone in sechs Unterfraktionen ergab, dass der Anteil an Ton  $< 2 \mu\text{m}$  jeweils über 60 % liegt und damit wichtige Anforderungen der Deponiebarriere wie die hydraulische Abdichtung erfüllt werden können.

AP3: Keine Arbeiten im Berichtszeitraum.

AP4: Von HZDR wurden im September 40 Metallplättchen aus verschiedenen mikrobiellen Exponierungsversuchen erhalten, wo der Korrosionsfortschritt über die Bildung sekundärer Phasen in Bildaufnahmen sowie der Quantifizierung der Oberflächenrauheit für jeweils vier Aufbereitungen (i: wie erhalten, ii: Ultraschallbehandlung und iii, iv: Einsatz weicher bzw. harter Bürste) vorgenommen wurde. Es zeigte sich, dass, unabhängig von der Vorbehandlung, kurzfristige Exposition die Rauheit der Plättchen zunächst herabsetzt, diese aber mit der Länge der Exposition und bei erhöhter Temperatur wieder ansteigt.

AP5: Nach Diskussion mit den Kooperationspartnern GRS und TUM wurden in die Versuche zur Kennzeichnung der Veränderung der chemischen Stabilität von Smektit durch Adsorption von Fe-Ionen an den Kantenflächen zwei Reinminerale verschiedener Schichtladung (Pyrophyllit bzw. Illit (letzteres mit besonders hohem Anteil an Kantenflächen) sowie drei weitere Bentonite eingesetzt. Die Messung der freigesetzten Si-Mengen nach verschiedener Vorbehandlung, in der Zeitreihe bis 16 Tage und verschiedener Zugabemengen der dreiwertigen Kationen Al und Fe wurde im Dezember abgeschlossen. Sowohl aus Desorptions- als auch Adsorptionsversuchen kann eine stabilisierende Wirkung des Vorhandenseins mehrwertiger Kationen an den Oberflächen der Festphase naheliegend gemacht werden. Dies ist aber nicht durchweg für alle eingesetzten Proben feststellbar. Hier müssen noch andere steuernde Faktoren wie die „Senke“ für mehrwertige Kationen im Zwischenschichttraum in Erwägung gezogen werden. Im Vergleich der Stabilität der Dreischichtsilicate in Abhängigkeit von der Mineralart ergibt sich die Reihung Pyrophyllit > Smektit > Illit, die mit der theoretischen Erwartungshaltung einhergeht, dass isomorpher Ersatz die Stabilität von Silicaten herabsetzt.

#### 4. Geplante Weiterarbeiten

AP1: Auswertung der tomographischen *ex situ* Aufnahmen. Festlegung der Umgebungsbedingungen für die kommenden tomographischen *in situ* Untersuchungen im Juli 23. Quantifizierung der  $\text{CO}_2$ -Freisetzung mittels Gaschromatographie.

AP2: Quantifizierung des Fe-Oxidationsstatus und mineralogischer Zusammensetzung von Schwer- und Leichtmineralen aus der Dichtefraktionierung.

AP4: Auswertung des erhobenen Datensatzes zur Metallkorrosion in Bentoniten mit/ohne mikrobiellen Einfluss. Oberflächenladungsbestimmungen und Untersuchung der Aggregation am Zetasizer. 30 Tonproben werden vom HZDR erhalten.

AP5: Diskussion und Ausweitung der Versuche zur Erhöhung der chemischen Stabilität von Dreischichtsilicaten durch Adsorption von Fe- und Al-Ionen an den Kantenflächen.

#### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Im diesem Berichtszeitraum wurden keine Publikationen veröffentlicht.

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> 02 E 11880	
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Sicherheitsrelevante Untersuchungen zur Bentonitaufsättigung (SIRUB)			
<b>Zuordnung zum FuE-Förderkonzept des BMWi 2021 - 2025:</b> FuE-Feld C2.3: Geotechnische und technische Barrieren			
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.04.2021 bis 31.12.2023		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2022 bis 31.12.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 1.248.124,00 EUR		<b>Projektleiter:</b> Dr. Klaus-Peter Kröhn	

## 1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

a) Wie entwickelt sich die schmale, vollaufgesättigte Zone am Bentonit-Wasser-Kontakt?

Motiviert durch Beobachtungen im Projekt EBS (FKZ 02E9430 (BMW), GRS-199)

b) Wie quillt Bentonit in einen begrenzt freien Raum?

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

c) Können Einheitsisothermen aus Montmorillonitgehalt und Kationentyp abgeleitet werden?

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

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

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

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

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

## 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

Bei der Durchführung des Vorhabens werden folgende Arbeitspakete bearbeitet:

AP 1: Vorbereitende Arbeiten

AP 2: Aufsättigung am Bentonit-Wasser-Kontakt

AP 3: Begrenzt freie Quellung

AP 4: Einheitsisothermen

AP 5: Endporosität nach der Aufsättigung über Dampf

AP 6: Interaktion von Grundwasser und Bentonit im Kristallin

AP 7: Erstellung des Abschlussberichts

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Zu AP1: Es wurde ein neuer 3D-Scanner beschafft und entsprechende Schulungen besucht. Bezüglich der Infrarotdetektion des aufsättigenden Bentonits wäre eine Hyperspektralkamera geeignet gewesen, hätte aber den im Projekt gesetzten Kostenrahmen gesprengt. Stattdessen wurde versucht, diese Aufgabe mit einem Spektrometer zu lösen. Testaufnahmen mit einem Leihgerät waren vielversprechend. Eine abschließende Bewertung steht unmittelbar bevor. Für AP4 wurden Adsorptions- und Desorptionsisothermen von nunmehr 17 Proben von Bentoniten unterschiedlicher Herkunft, die im Rahmen des Projekts UMB (FKZ 02E 11344) akquiriert worden waren, ermittelt. Durch Vergleich mit den im Projekt BIGBEN (FKZ 02E 11284) ermittelten Hysteresekurven sind Dominanz von Na- bzw. Ca-Kationen in den Bentonitproben klar anhand der Kurvenformen erkennbar.

Die mit denselben Arbeitsmitteln erhobenen Ergebnisse aus dem Projekt BIGBEN (FKZ 02 E 11284) zu Hysterese, Scanlinien und Temperaturabhängigkeit der Isothermen wurden auf der Clay Conference 2022 in Nancy präsentiert.

Die Aufsättigungsmessungen über Wasserdampf im Rahmen von AP5 zur Bestimmung der Endporosität wurden gestartet und ergänzt um weitere Aufsättigungstests mit flüssigem Wasser. Der Zustand voller Aufsättigung ist noch nicht erreicht.

Zur Vorbereitung der geplanten Tests in AP6 wurden erste Durchströmungsversuche mit gedruckten physikalischen Kluftmodellen zur Optimierung der Versuchsführung und der Beobachtungstechnik durchgeführt. Dabei wurde eine gefärbte Tracerflüssigkeit für die optische Detektion verwendet. Um sicherzustellen, dass diese Flüssigkeit keinen Einfluss auf den Aufsättigungsvorgang im Bentonit nimmt, wurden weitere Aufsättigungstests mit Leitungswasser und eingefärbtem Wasser gestartet.

Aufgrund einer Einladung von SKB zum Scannen von Kluftmaterial aus dem HRL Äspö, ist geplant, die für AP6 vorgesehenen Versuche mit Modellen aus den neuen Scans durchzuführen.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Auswertung der Aufnahmen mit dem Spektrometer zur Auswahl einer geeigneten Gerätekonfiguration für IR-Aufnahmen und Beschaffung (AP1)
- Anfertigung von Messzellen (AP1)
- Erstellung einer Korrelation zwischen dem Wassergehalt im Bentonit und den IR-Daten (AP1)
- Beginn der Aufsättigungsversuche (AP2 und AP3)
- Abschluss der Isothermenmessungen und Auswertung (AP4)
- Fortsetzung der Aufsättigungsversuche über Dampf (AP5)
- Gestaltung des Versuchsaufbaus für den Kontakt einer künstlichen Kluft mit kompaktiertem Bentonit (AP6)
- Scan-Kampagne in Oskarshamn zwecks In-situ-Datenakquisition von Kluftoberflächen (AP6)

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine

<b>Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer:</b> BGE TECHNOLOGY GmbH		<b>Förderkennzeichen:</b> 02 E 11890A	
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Entwicklung und Test eines erweiterten Hoek-Brown Stoffmodells zur Berücksichtigung anisotropen Festigkeitsverhaltens bei der Anwendung der Integritätskriterien für kristalline Wirtsgesteine (BARIK), Teilprojekt A			
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> F&E-Bereich 4: Sicherheitsnachweis F&E-Feld 4.1: Phänomene, Prozesse und Modelle, Entwicklung prozessbeschreibender Modelle und von process level codes (Skaleneinfluss - upscaling) sowie deren Qualifizierung. F&E-Feld 4.3: Weiterentwicklung und Aktualisierung der Methoden und Rechenprogramme für Langzeitsicherheitsanalysen.			
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.03.2021 bis 31.10.2023		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2022 bis 31.12.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 393.063,82 EUR		<b>Projektleiterin:</b> R. Paola León Vargas	

## 1. Vorhabensziele

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

## 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

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

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

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Nach der erfolgreicherer Implementierung der zweiten Stufe des BARIK-Stoffmodells in FLAC3D v7 hat TUBAF eine .dll-Datei für das Testen die BGETEC zur Verfügung gestellt. Hiermit erfolgten die ersten Testberechnungen mittels eines dreidimensionalen Modells einer Endlagerungstrecke, die bereits im FuE-Vorhaben CHRISTA-II angewendet wurde. Die ersten Ergebnisse haben gezeigt, dass die Isotropie, Anisotropie und Orthotropie Bedingungen der Matrix richtig implementiert wurden, da keine Fehlermeldung oder unlogischen Spannungs- bzw. Deformationszustände erkannt wurden. Auch die Variation der Kluftwinkel wurde mit dem Stoffmodell problemlos dargestellt. Die Verteilung der Spannungen sind plausibel. Diese ersten Ergebnisse wurden in Rahmen eines virtuellen Treffens präsentiert und projektintern diskutiert. Darüber hinaus, wurde für die Durchführung umfangreicher Verifizierungsrechnungen des Stoffmodellansatzes mit anderen bereits implementierten Stoffgesetzen (Ubiquitus-Joint und Hoek-Brown-PAC) Referenzwerte erarbeitet und diese Verifizierungsrechnungen vorbereitet.

Die Implementierung des BARIK-Stoffmodells mithilfe von Open-Source-Tool MFront für OpenGeoSys wurde initiiert. Da im Gegensatz der ITASCA Software, das Hoek-Brown-Stoffmodell nicht bereits in OpenGeoSys implementiert ist, wurde deren Implementierung als erste Schritt vorgenommen. Dieses implementierte Stoffgesetz wurde mit den Referenzdaten eines Benchmarks mit FLAC3D v7 verglichen. Die ersten Testberechnungen haben gezeigt, dass die Implementierung erfolgreich war.

Eine kommentierte Literaturrecherche und die Dokumentation der ersten Reihe an Verifizierungsrechnungen wurden im Rahmen des AP5 erarbeitet. Im Rahmen des 51. Geomechanik-Kolloquiums im November 2022 wurde das Projekt BARIK mit einem Poster vorgestellt.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Implementierung von mind. eine Schwächefläche in die verifizierte erste Stufe des BARIK-Stoffmodells in MFront für OpenGeoSys
- Implementierung der hydromechanischen Kopplung und strain-softening-Funktionen in das BARIK-Stoffmodell
- Fortsetzung der Verifizierungsrechnungen mittels FLAC3D
- Dokumentation der Verifizierungsrechnungen zum Hoek-Brown-Versagen des BARIK-Stoffmodells
- Vorbereitung der Veröffentlichung erster Ergebnisse des Forschungsvorhabens

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

León-Vargas, P.; Friedel, M.; Hassanzadegan, A.; Rahmig, M.; Weber, F.; Jobmann, M. Konietzky, H. (2022): *Anisotropes Stoffmodell für Kristallingestein auf Basis von Hoek-Brown unter Berücksichtigung von bis zu drei Kluftsystemen*. Poster im Rahmen des 51. Geomechanik-Kolloquiums 2022 der TU Bergakademie Freiberg am 18. November 2022. Freiberg.

<b>Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer:</b> Technische Universität Bergakademie Freiberg		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11890B</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Entwicklung und Test eines erweiterten Hoek-Brown Stoffmodells zur Berücksichtigung anisotropen Festigkeitsverhaltens bei der Anwendung der Integritätskriterien für kristalline Wirtsgesteine (BARIK), Teilprojekt B		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Nukleare Entsorgung: siehe Förderkonzept 2015-2018 Nukleare Entsorgung: siehe Förderkonzept Grundlagenforschung Energie 2020+ <b>FuE-Bereich 4:</b> „Sicherheitsnachweis“, speziell die <b>FuE-Felder 4.1</b> „Phänomene, Prozesse und Modelle“ als auch <b>4.3</b> „Systemanalysen und Werkzeuge der Sicherheitsanalysen“		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.03.2021 bis 31.10.2023	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2022 von bis 31.12.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 294.776,55 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr.-Ing. habil. Heinz Konietzky	

### 1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

### 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

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

AP 1 – Entwicklung Stoffmodell:

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

AP 2 – Laborversuche:

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

AP 3 - Implementierung und Test:

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

AP 4 – Evaluierung:

- Evaluierung des Stoffgesetzes beim Einsatz als Dilatanzkriterium.

AP 5 – Dokumentation:

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

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Weiterführende Umsetzung des Konzepts und Recherchen zum mechanischen Teil des Stoffgesetzes. Dokumentation des erstellten Stoffgesetz-Konzeptes (AP5). Erstellung und Implementierung eines orthotrop-elasto-plastischen Stoffgesetzes mit Hoek-Brown-Versagenskriterium der Gesteinsmatrix („zweiter Schritt des BARIK-Stoffgesetz“) (AP3) und einer .dll-Datei zur Einbindung des zweiten Teils des BARIK-Stoffgesetzes in die Software FLAC3D. Anschließend Durchführung umfangreicher Verifizierungen von isotrop-elasto-plastischen Belastungsfällen anhand generischer Verifizierungsmodelle (Würfel). Zusätzliche Tests an realitätsnahen Modellen (zylindrischer Tunnel, Böschung). Verifizierung an Würfel- und realen Modellen unter einer Vielzahl an Parametervariationen (Winkelvariation der Anisotropie-Ausrichtung). Umfassende Dokumentation der isotrop-elasto-plastischen Verifizierungsrechnungen (AP5). Beginn der Implementierung eines ersten Schwächeflächensystems auf Basis des Ubiquitous-Joint-Ansatzes mit der Konzeptentwicklung der Ermittlung der elastischen Eigenschaften der Schwächefläche aus der orthotropen Elastizitätsmatrix des Gesteins. Beginn der Verifizierung des Konzepts zur Bestimmung der elastischen Schwächeflächenparameter. Erste Entwicklung eines Verifizierungskonzeptes für das erweiterte BARIK-Modell mit Hoek-Brown-Versagen und einer Schwächefläche.

Parallel Weiterführung des festgelegten Laborprogrammes am Freiburger Gneis, vor allem der rein mechanischen Triaxialversuche in den noch offenen Winkelvariationen  $0^\circ$  und  $90^\circ$  der Lasteinleitung zur Anisotropie-Ausrichtung, Einstufentriaxialversuche zur genaueren Festigkeitsuntersuchung der Schwächefläche im Gneis sowie der Herstellung von Prüfkörpern und Aufsättigung dieser in Vorbereitung auf die hydraulisch gekoppelten Triaxialversuche (AP2).

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Weiterführen der Verifizierung zur Ermittlung der elastischen Parameter der Schwächeflächen aus der globalen Elastizitätsmatrix und anschließende Testrechnungen mit dem erweiterten BARIK-Stoffmodellen unter Berücksichtigung der ersten Schwächefläche. Weitere Implementierung der nächsten zwei Schwächeflächen in die verifizierte zweite Stufe des BARIK-Stoffgesetzes, ebenso auf Basis des Ubiquitous-Joint-Ansatzes (AP3). Umfangreiche Dokumentation der Verifizierungsrechnungen zur zweiten Entwicklungsstufe des BARIK-Stoffgesetzes (AP5). Weitere Durchführung der geplanten Laborversuche zur Charakterisierung des anisotropen Verhaltens von Gneis mit Hauptaugenmerk auf den hydraulisch gekoppelten Triaxialen Druckversuchen.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

- Poster im Rahmen des 51. GMK.

<b>Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer:</b> BGE TECHNOLOGY GmbH		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11900</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Langzeitsicherheit von Verschlussystemen in Schächten und Rampen im Vergleich (LA-RYSSA)		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm</b> FuE-Feld C2.1 - Sicherheits- und Endlagerkonzepte FuE-Feld C2.3 - Geotechnische und technische Barrieren		
<b>Laufzeit des Vorhabens</b> 01.06.2021 bis 31.07.2023	<b>Berichtszeitraum</b> 01.07.2022 bis 31.12.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 479.325,30 EUR	<b>Projektleiter:</b> Philipp Herold	

### 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP2: Für den Vergleich unterschiedlicher Verschlussysteme wurden Indikatoren mit relativ einfach zu ermittelnden Kennzahlen entwickelt: Dichtheit, Rückhaltevermögen und Robustheit. Für jeden der drei Indikatoren wurden einzelne Verschlusskonzepte als Beispiele herangezogen und getestet. Die Tests dienten der Erprobung der Methodik und Anwendbarkeit der Indikatoren. Der Indikator Dichtheit erwies sich als der am Einfachsten umzusetzende Indikator. Mit Hilfe von Sensitivitätsuntersuchungen konnte sehr klar der Einfluss unterschiedlicher Parameter (Permeabilität, Länge, Art des Dichtelementes) dargestellt werden.

Der Indikator Rückhaltevermögen soll entsprechend des entwickelten Ansatzes möglichst alle Verschlussmaterialien einschließen. Signifikante Rückhalteigenschaften sind von Bentonitmaterialien und Betonbaustoffen zu erwarten. Für Bentonit wurde die Smektitmasse als einfach zu ermittelnder Parameter/Kennzahl ausgewählt. Für Betonbaustoffe ist eine ähnlich einfache Auswahl nicht möglich. Unterschiedliche (Zement-)Phasen weisen in unterschiedlichen geochemischen Milieus und Korrosionsstadien unterschiedliche Rückhalteigenschaften auf. Eine Vergleichbarkeit sollte über eine Vereinfachung und Kategorisierung der möglichen Zustände erreicht werden. Für zwei Leitnuklide wurden in drei Referenzsystemen (Lösungen) das Rückhaltevermögen bestimmt und daraus eine Kennzahl für jeden Fall abgeleitet. Die Bestimmung des Indikators ist mit diesem Ansatz deutlich aufwändiger. Als Alternative steht die Durchführung von Sensitivitätsanalysen innerhalb eines definierten Parameterraums zur Verfügung. Trotzdem müssen die Kennzahlen von Bentonit und Beton zusammengeführt werden.

Für den Indikator Robustheit wurden drei verschiedene Kennzahlen entwickelt. Die Kennzahl „Sensitivität“ bzw. „Empfindlichkeit“ kann sowohl für die Dichtheit als auch das Rückhaltevermögen aus den durchgeführten Parameterstudien und Sensitivitätsanalysen abgeleitet werden. Der Indikator „Dichtheit“ wird über das Verhältnis von Grenzgeschwindigkeit zu mittlerer Strömungsgeschwindigkeit im Verschluss definiert. Dieses Verhältnis kann genutzt werden, um zu überprüfen, wie empfindlich das Barrierensystem auf den Ausfall oder Leistungsverlust eines oder mehrerer ihrer Elemente reagiert. Ein Design gilt dann als ausgefallen, wenn die mittlere Strömungsgeschwindigkeit die Grenzgeschwindigkeit übersteigt. Je weniger Designs ausfallen bzw. je größer der Leistungsverlust bis zum Ausfall sein darf, um so robuster ist das Verschlussystem.

AP3: Die angepasste Methodik wurde im Weiteren auf die anderen Verschlussysteme übertragen. Die Indikatoren erlauben nicht nur einen Vergleich der Verschlussysteme von Schacht und Rampe. Ein Vergleich unterschiedlicher Verschlusskonfigurationen innerhalb eines Verschlussystems ist ebenso möglich.

Aus dem Vergleich der Indikatoren ergeben sich auch innerhalb eines Verschlussystems Konfigurationen mit besonders günstigen Eigenschaften. Im Rahmen der Nachweisführung ist nachzuweisen, dass solche Konfigurationen herstellbar sind. Dazu wurden vergleichbare Anwendungsbeispiele herangezogen. Zum Beispiel können nach den Indikatoren Lange Verschlusselemente in Rampen einen Leistungsverlust bei der Permeabilität teils kompensieren. Die Errichtung solcher langen Elemente erfordert die Entfernung des Ausbaus, was einen hohen technischen Aufwand und ein hohes Risiko in der Betriebssicherheit mit sich bringt. Schlitzte können eine Alternative darstellen, die eine Einhaltung der Leistungsziele erlauben.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

AP4: Der Vergleich von verschiedenen Verschlussystemen von Rampen und Schächten wird fortgeführt und im nachfolgenden Berichtszeitraum abgeschlossen.

AP5: Die durchgeführten Untersuchungen und die dabei erzielten Ergebnisse aller Arbeitspakete werden zusammenfassend in einem Abschlussbericht dokumentiert.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen, keine

<b>Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer:</b> Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf (HZDR), Bautzner Landstr. 400, 01328 Dresden		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11911A</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Vorhersage der heterogenen Radionuklidsorption auf Kluft- und Störungsflächen in granitischen Gesteinen: Parametrisierung und Validierung verbesserter reaktiver Transportmodelle (WTZ-Granit), Teilprojekt A		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle 1.2 Wissenschaftliche Grundlagen der Standortauswahl		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.04.2021 bis 31.03.2024	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2022 bis 31.12.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 253.632,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Cornelius Fischer	

## 1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

## 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

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

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

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

**AP 4:** Nachwuchsförderung und internationaler Austausch

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Die numerischen Arbeiten zur Transportheterogenität auf Kluftflächen im Granit von Soultz-sous-Forêts wurden im Berichtszeitraum fortgesetzt und abgeschlossen. Die resultierenden Daten wurden ausgewertet, insbesondere bzgl. der unterschiedlichen Charakteristika der berechneten Durchbruchkurven. Weiterhin wurden Vergleiche der Ergebnisse von bei dem Projektpartner FSU Jena existierenden 2,5D- und hier erzielten 3D-Transportmodellierungen durchgeführt. Darauf aufbauend wurden Möglichkeiten und Grenzen zu Modellvereinfachungen untersucht. Dieser Arbeitsabschnitt wurde gemeinsam mit dem Projektpartner an der FSU Jena durchgeführt und zur Publikation in einem Manuskript vorbereitet. Weiterhin wurden 15 numerische Sensitivitätsanalysen durchgeführt, um den Einfluss der für die Simulationsrechnungen benutzten Gittergrößen zu analysieren. Dies ist insbesondere hilfreich zur Minimierung des Rechenaufwandes unter Berücksichtigung der jeweiligen Kluft-/ Störungswandtopografie auf die Fließpfadentwicklung. Die quantitativen Veränderungen von Durchbruchkurven aufgrund dieser Parametervariation wurden systematisch untersucht und verglichen. Der Einfluss von kleinskaligen Oberflächenbausteinen ( $\mu\text{m}$ -skalige Rauheit) und der Einfluss gröberskaliger Geometrievariabilität (Krümmung der Kluft- und Störungsflächen) auf die Fließpfadentwicklung wurden numerisch untersucht.

Computertomografische Datensätze für Probenmaterial mit mineralisierten Klüften in Kristallingesteinen von Olkiluoto, Finland wurden aufgenommen. Die CT-Daten des Probenmaterials aus Königsbrück wurden ausgewertet.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Die Auswertung der CT-Daten aus Olkiluoto ist geplant, dafür sind umfangreichere Meßartefaktkorrekturen erforderlich. Positronen-Emissions-Tomografie- (PET-)Messungen der Fließpfade auf Klüften werden verarbeitet und quantitativ ausgewertet. Simulationsrechnungen auf den Kluftgeometrien von Olkiluoto sind geplant und sollen mit den Durchbruchkurven von Soultz-sous-Forêts verglichen werden. Vergleiche der Transportmodellierungen mit den PET-Datensätzen bzgl. der hydrodynamischen Parameter sind geplant.

Darüberhinaus sind numerische Arbeiten zur Matrixdiffusion im kluftbenachbarten Material geplant. Dafür sollen geometrische Inputdaten zu potentiellen Alterationsvolumina (Mineralalterationen, sekundäre Porosität) in der Kluftnachbarschaft erzielt werden, die für das Transportmodell die geometrische Grundlage liefern. Als mögliches Material kommt der Granodiorit von Königsbrück in Frage. Die Untersuchungen zu Alterationstyp und -intensität müssen dafür weitergeführt werden.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

-

<b>Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer:</b> Friedrich-Schiller-Universität Jena, Fürstengraben 1, 07743 Jena		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11911B</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Vorhersage der heterogenen Radionuklidsorption auf Kluft- und Störungsflächen in granitischen Gesteinen: Parametrisierung und Validierung verbesserter reaktiver Transportmodelle (WTZ-Granit), Teilprojekt B		
<b>Zuordnung zum FuE-Projektförderprogramm: Forschung zur nuklearen Sicherheit</b> Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte, Feld: 2.3		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.04.2021 bis 31.03.2024	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2022 bis 31.12.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 249.905,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Thorsten Schäfer	

## 1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

## 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

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

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

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

AP 4: Nachwuchsförderung und internationaler Austausch

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

**AP1:** Die im Teilprojekt 02 E 11911B erhobenen geochemischen und geophysikalischen Daten wurden interpretiert und mit Literaturdaten verglichen. Beispielsweise wurden entlang von mit hydrothermalen Sekundärphasen gefüllten Klüften clogging-Effekte beobachtet, zurückzuführen auf in das Wirtsgestein infiltrierte Tonminerale (Lichtmikroskopische Beschreibung, Geochemische Bulk-Analyse: Wirtsgestein an Kluftoberfläche:  $\text{LOI}_{1050^\circ\text{C}} = 2.08 \text{ g}/100 \text{ g}$ ,  $\emptyset$  frisches Gestein:  $\text{LOI}_{1050^\circ\text{C}} = 0.87 \text{ g}/100 \text{ g}$ ). Anhand von hochauflösender Farbspektroskopie und Bestimmung der magnetischen Suszeptibilität wurde weiterhin die Abgrenzung von Homogen- versus Alterationsbereichen quantifiziert. Zur Abschätzung von Alterationseffekten erfolgten fortführende Dünnschliffanalysen. Die  $\mu\text{CT}$ -Messungen konzentrierten sich im 3. Halbjahr auf die Bohrkerne aus Beishan, welche der FSU im ELF-China Pilot Projekt zur Verfügung gestellt wurden (BMWK Förderkennzeichen 02E11850E). Die Scans umfassen offene und verheilte Klüfte, welche Grundlage sind für im **AP3** folgende Transportmodellierung im Dual-Porosity Systems.

**AP2:** Die Eluationsversuche des Lausitzer Granodiorits vom Aufschluss Königsbrück wurden weitergeführt. Dabei zeigte sich, dass der pH Wert der Gleichwässer zwischen artifiziellen Regenwässern und Proben des Lausitzer Granodiorits entgegen der Erwartungen im basischen Bereich liegt. Bei frischem Gestein stellten sich nach 47 Tagen ein pH-Werte von  $\sim 9.2$  ein, bei alteriertem Gestein bei  $\sim 8.75$ . Der pH-Wert konnte im **AP3** numerisch reproduziert werden. Desweiteren wurden mittels Ionenchromatographie organische Säuren in den Gleichgewichtswässern nachgewiesen. Es konnten Biofilme mit stäbchenförmigen beweglichen Bakterien identifiziert werden. Da davon auszugehen ist, dass diese Biofilme die Elementkomposition der Lösungen verfälschen, werden die Eluationsversuche im Rahmen einer Qualifikationsarbeit wiederholt. Dazu wurde erneut Material tieferer, frischerer Bereiche des Plutons im Steinbruch Königsbrück beprobt. Im Rahmen der mit diesen frischen Proben durchgeführten Batchversuche soll beobachtet werden, ob die Lösungsprozesse ähnliche pH-Werte und Ionenfrachten erzeugen.

**AP3:** Die Ergebnisse der Eluationsversuche wurden mit den aktuellen Modellierungsarbeiten in **AP3** abgeglichen und Details der Probenpräparation, Analysetechniken und Datenerhebung sowie das weitere experimentelle Vorgehen zwischen den Projektpartnern abgestimmt.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Bohrkerne, deren Porerraum bereits charakterisiert ist, werden für Geo-PET Versuche vorbereitet. Anhand von Batchexperimenten mit Seltenerdenelementen wird die Sorptionskapazität verschiedener Alterationsstufen im Lausitzer Granodiorit bestimmt. Desweiteren werden Feldspäte aus dem Mineralverbund abgetrennt. Diese sollen zur Herstellung von Tonmineralpräparaten zur XRD-Bestimmung sowie für Sorptionsexperimente an einzelnen alterierten Feldspäten genutzt werden. In Vorbereitung auf die orts aufgelösten geochemische Analyse einzelner Mineralkörner im Verbund werden LA-ICP-MS-Messungen an ausgewählten Proben durchgeführt.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

- **veröffentlicht:** Kusturica A, van Laaten N, Drake H, Schäfer T (2022) LA-ICP-MS analysis of trace and rare earth-elements in calcite fracture fillings from Granitoid Rocks (Sweden) *Environmental Earth Sciences*.
- **geplant:** Kusturica A, Pirrung M, Hupfer S, Fischer C, Schäfer T (to be submitted) Pore space increase in response to different alteration stages of granitoid rocks based on combined  $\mu\text{CT}$  and geochemical and mineralogical analysis. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences*.

<b>Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer:</b> Forschungszentrum Jülich GmbH, Institut für Energie- und Klimaforschung (IEK) – Nukleare Entsorgung und Reaktorsicherheit (IEK-6)		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11921A</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Untersuchungen zur SEPARation von AMericiem aus hochradioaktiven Abfalllösungen (SEPAM), Teilprojekt A		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> 7. Energieforschungsprogramm „Innovationen für die Energiewende“ - Themenfeld Entsorgungs- und Endlagerforschung „Untersuchungen zu alternativen Entsorgungsmethoden anstelle der direkten Endlagerung in einem Bergwerk“		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.04.2021 bis 31.03.2024	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2022 bis 31.12.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 254.678,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Giuseppe Modolo	

## 1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

## 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

Das Projekt wird in vier Arbeitspaketen bearbeitet:

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

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

#### *Arbeitspaket 1:*

Die Untersuchungen zum Extraktionsverhalten von in Zusammenarbeit mit der Universität Twente in den Niederlanden entwickelten Diglykolamid-Analoga (Tetraoctyl- und Tetradecyl-DGA) mit zweifacher Substitution des Molekülrückgrats durch Propyl- und Ethylmethylketten mit verschiedenen Diastereomeren (*anti* und *syn*) wurden fortgesetzt. Dabei zeigten sich verbesserte Verteilungsverhältnisse dreiwertiger Ionen durch Erhöhung der Konzentration von p-TODGA (*syn*), was den direkten Zusammenhang zwischen Komplexbildung und Ligandenkonzentration belegte. Zur Bestimmung des Metall-zu-Liganden Verhältnisses wurden durch Steigungsanalyse verschiedene Konzentrationen von p-TDDGA (*anti*) mit konstanter HNO<sub>3</sub>-Konzentration getestet. Es wurde ein Verhältnis von 1:3 gefunden, was dem Komplexbildungsverhalten von anderen DGA-Liganden entspricht.

BTP-octa-COOH, ein hydrophiler Komplexbildner, wurde als CHON-Alternative für SO<sub>3</sub>-Ph-BTP in Verbindung mit TODGA als Extraktionsmittel getestet. Dabei wurde eine gute Selektivität für An(III) gegenüber Ln(III) gefunden. Die Verteilungsverhältnisse weisen im Vergleich etwas niedrigere Werte als SO<sub>3</sub>-Ph-BTP auf. Dennoch ist es ein vielversprechendes Molekül, da durch die Abwesenheit von Schwefelatomen die Erzeugung von sekundären festen Abfällen vermieden wird. Zur weiteren Aufklärung der Koordinationschemie von BTP-octa-COOH wurden TRLFS-Messungen mit dreiwertigen Metallionen in zwei Systemen (HNO<sub>3</sub> und HClO<sub>4</sub>) durchgeführt.

#### *Arbeitspaket 2:*

Im Berichtszeitraum wurden keine Arbeiten durchgeführt.

#### *Arbeitspaket 3:*

Im Berichtszeitraum wurden keine Arbeiten durchgeführt.

#### *Arbeitspaket 4:*

Die Doktorandin hat ihre Extraktionsergebnisse auf mehreren internationalen Konferenzen präsentiert und den ersten Zeitschriftenartikel veröffentlicht (s.u.).

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Neue hydrophile Komplexbildner aus der Klasse der Pyridin-Triazine und ein neuer Ligand (2-amino-2-oxoethoxy) acetic acid) werden getestet.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

1. Diaz Gomez, L. J.; Wilden, A.; Modolo, G.; Gullo, M. C.; Verboom, W. *Solvent extraction studies of different diastereomers of modified diglycolamide ligands for An(III) and Ln(III) extraction*, Actinides Revisited, Dresden, Germany, 21-23 September, 2022. Poster.
2. Wilden, A.; Geist, A.; Modolo, G. *Process development studies for the separation of trivalent actinides from used nuclear fuel solutions*, Actinides revisited 2022, 21.-23.09.2022, Dresden, Deutschland, Vortrag.
3. Diaz Gomez, L. J.; Wilden, A.; Modolo, G.; Gullo, M. C.; Verboom, W. *Solvent extraction studies of different diastereomers of modified diglycolamide ligands for An(III) and Ln(III) extraction*, International Solvent Extraction Conference (ISEC 2022), Gothenburg, Sweden, 26-30 September, 2022. Poster (3<sup>rd</sup> place poster prize).
4. Diaz Gomez, L. J.; Wilden, A.; Schneider, D.; Papparigas, Z.; Modolo, G.; Gullo, M. C.; Huskens, J.; Verboom, W. *Synthesis and evaluation of new modified diglycolamides with different stereochemistry for extraction of tri- and tetravalent metal ions*. New J. Chem. 2023. DOI:10.1039/D2NJ05663A.

<b>Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer:</b> Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT)		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11921B</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Untersuchungen zur SEPARation von AMericiem aus hochradioaktiven Abfalllösungen (SE-PAM) Teilprojekt B: Thermodynamische Daten und Spektroskopische Untersuchungen		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> 7. Energieforschungsprogramm „Innovationen für die Energiewende“ – Themenfeld Entsorgungs- und Endlagerforschung „Untersuchungen zu alternativen Entsorgungsmethoden anstelle der direkten Endlagerung in einem Bergwerk“		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.04.2021 bis 31.03.2024	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2022 bis 31.12.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 250.000,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Andreas Geist	

## 1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

## 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

### *Arbeitspaket 1:*

Grundlagen Koordinations- und Extraktionschemie

### *Arbeitspaket 2:*

Prozessrelevante Optimierungen

### *Arbeitspaket 3:*

Modellierung und Prozesstests

### *Arbeitspaket 4:*

Nachwuchsförderung

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Für die Komplexbildung von Cm(III) mit N-Donorliganden nach dem CHON-Prinzip lag der Fokus auf Bis-Pyrazolyl-pyridinen **A** und 1,2,3-Triazol-pyridinen **B**. Ziel ist es, den Einfluss der Anzahl und Position der Stickstoffatome im aromatischen Fünfring auf die Komplexbildung von dreiwertigen Actiniden und Lanthaniden zu untersuchen.

Die Komplexbildung von Cm(III) mit <sup>t</sup>Bu-C4-BPP in Methanol mit 1,5 Vol.-% Wasser wurde mittels TRLFS untersucht. Bereits bei einer BPP-Konzentration von  $1,0 \times 10^{-8} \text{ molL}^{-1}$  bildete sich der 1:1-Komplex (Emissionsmaximum bei 603.0 nm). Ab einer BPP-Konzentration von  $1,0 \times 10^{-4} \text{ molL}^{-1}$  bildete sich der 1:2-Komplex (607.3 nm) und ab  $1,0 \times 10^{-3} \text{ molL}^{-1}$  der 1:3-Komplex (611.7 nm). Es wurden folgende Stabilitätskonstanten bestimmt:  $\log \beta_1 = 7,2$ ;  $\log \beta_2 = 10,1$  und  $\log \beta_3 = 11,8$ . Für alle drei Spezies konnte keine signifikante Kinetik beobachtet werden. Anfängliche Hinweise auf eine solche stellten sich als Temperatureffekte heraus.

Die Speziation von Eu(III) mit <sup>t</sup>Bu-C4-BPP konnte noch nicht abschließend geklärt werden, da bereits bei initialen Konzentrationen von  $1,0 \times 10^{-5} \text{ molL}^{-1}$  Eu(III) und  $1,0 \times 10^{-7} \text{ molL}^{-1}$  <sup>t</sup>Bu-C4-BPP signifikante Komplexbildung beobachtbar war.

Weiterhin wurden die Extraktionseigenschaften <sup>t</sup>Bu-C4-BPP untersucht. Die organische Phase bestand aus einer Lösung von  $10 \text{ mmolL}^{-1}$  <sup>t</sup>Bu-C4-BPP, 0,5 M 2-Bromhexansäure und 10 Vol.-% 1-Octanol in Kerosin. Die Verteilungsverhältnisse von Am(III) ( $D_{\text{Am}}$ ) und Eu(III) ( $D_{\text{Eu}}$ ) wurden bei  $\text{HNO}_3$ -Konzentrationen zwischen  $0,05 \text{ molL}^{-1}$  und  $1,00 \text{ molL}^{-1}$  untersucht. Es nahmen sowohl  $D_{\text{Am}}$  als auch  $D_{\text{Eu}}$  mit zunehmender  $\text{HNO}_3$ -Konzentration ab. Dies bestätigt die Extraktion durch Kationenaustausch.

Weiterhin wurde die Komplexbildung von Cm(III) mit PTTO in Methanol mit 1,5 Vol.-% Wasser mittels TRLFS untersucht. Es zeigte sich bereits bei initialen Konzentrationen von  $1,0 \times 10^{-7} \text{ molL}^{-1}$  Cm(III) und  $1,0 \times 10^{-8} \text{ molL}^{-1}$  PTTO signifikante Komplexbildung. Deshalb konnten die Untersuchungen bisher nicht abgeschlossen werden.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

#### *Arbeitspaket 1:*

Die Untersuchung der Komplexbildung von Eu(III) mit <sup>t</sup>Bu-C4-BPP wird vervollständigt. Die Komplexbildung von Cm(III) und Eu(III) mit PTTO wird weiter untersucht.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Stracke et al., Speciation investigations of trivalent actinides with N-donor ligands. *GDCh-Jahrestagung Fachgruppe Radiochemie 2022*, Bergisch Gladbach (Vortrag).

<b>Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer:</b> Rheinisch-Westfälische Technische Hochschule Aachen		<b>Förderkennzeichen:</b> 02 E 11931	
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Einfluss der thermischen Reife auf die gekoppelten hydro-mechanischen Eigenschaften niedrig-durchlässiger Tonsteine – Feld & Laborskala (Maturity)			
<b>Zuordnung zum FuE-Programm: Forschung zur nuklearen Sicherheit</b> Bereich C1: Standortauswahl, Feld: 1:2			
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.07.2021 bis 30.06.2025		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2022 bis 31.12.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 1.299.689,00 EUR		<b>Projektleiter:</b> 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 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**

Zum aktuellen Zeitpunkt wurden die Bohr- und Loggingarbeiten sowie die hydraulischen Tests an zwei von fünf Lokationen erfolgreich abgeschlossen. Die Stratigraphie der abgeschlossenen Bohrungen wurde bestimmt und zeigt an, dass der gewünschte Zielhorizont, das Pliensbachium, an allen Lokationen erfolgreich in der gewünschten thermischen Reife angetroffen wurde. In Bezug auf die Laborarbeiten wurden die geochemische Charakterisierung der beiden fertiggestellten Bohrungen (1 m Auflösung) abgeschlossen. Zudem wurden bereits Plugs gebohrt und die ersten petrophysikalischen und mineralogischen Messungen (z.B. He-Pycnometrie, Röntgendiffraktometrie) abgeschlossen. Auch die Plugs für geomechanische Versuche, zum Beispiel triaxiale Druck-Versuche, konnten hergestellt werden; sie werden zurzeit im Exsikkator äquilibriert.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

In den kommenden Monaten werden die restlichen Bohrarbeiten an den verbleibenden drei Lokationen durchgeführt, was zum Abschluss von AP1 und AP2 bis Ende 2023 führen wird. Parallel dazu werden die Laborversuche an den bereits vorliegenden Kernen fortgeführt. Bis Ende 2023 sollte die geochemische Charakterisierung mit Blick auf Stratigraphie, Lithologie sowie thermischer Reife für vier der fünf Lokationen weitgehend abgeschlossen sein. Zudem wird erwartet, dass bis dahin auch weitere, detailliertere petrophysikalische und geomechanische Daten vorliegen, so dass erste Korrelationen zwischen physikalischen Gesteinseigenschaften und thermischer Reife herausgearbeitet werden können.

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

- Jalali M., Grohmann S., Winhausen L., Erbacher J., Littke R., Amann F., 2022. MATURITY: The Effect of Thermal Maturity on the Coupled Hydro-Mechanical Properties of the Pliensbachian Low-Permeability Mudstones in the Lower Saxony Basin. Poster Präsentation auf den Tagen der Standortauswahl 2022.

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> 02 E 11941
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Wissenschaftliche Grundlagen zum Nachweis der Langzeitsicherheit von Endlagern (WiGru-9)		
<b>Zuordnung zum FuE-Förderkonzept des BMWi 2021 - 2025:</b> FuE-Feld C3.2 Methodische Grundlagen der Nachweisführung und FuE-Feld D1.1 Methoden und Instrumente des Wissens- und Kompetenzmanagements. Relevant für alle Wirtsgesteine		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.05.2021 bis 30.09.2024	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2022 bis 31.12.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 2.050.166,65 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. U. Noseck	

### 1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

### 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

TA 1: Bearbeitung grundlegender Aspekte

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

TA 2: Bearbeitung von Schwerpunktthemen

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

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

TA 1: - Teilnahme am RWMC Bureau Meeting mit Bericht über den Status der IGSC und seiner Subgroups (Crystalline Club, Salt Club), Leitung der IGSC Core Group Treffen, Leitung der jährlichen IGSC-Sitzung in Paris, Leitung der Arbeitsgruppe TARGES zur Erarbeitung neuer Themenfelder für die IGSC und Erstellung eines Papers über die Arbeiten der IGSC für die IHL-RWM Konferenz in Phoenix.

- Teilnahme an Sitzungen der IDKM- und EGAR-Bureaus, an den EGAR-Arbeitstreffen und an der 2. IDKM Topical Session. Erarbeitung und Auswertung eines Fragebogens zu Erfahrungen der IDKM- und IGSC-Mitglieder zum SER.

- Entwurf eines Questionnaires zur Bearbeitung durch die CRC Mitglieder, Ausarbeitung und Diskussion des Program of Work (PoW) 2023 – 2024, Planung des CRC-6 Meetings im Mai 2023 in Korea.

- TA 2:
- Fortsetzung der Analyse von komplexeren Modellsystemen verschiedener Länder im Rahmen der gemeinsamen Aktivität zur Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse (JOSA); Anwendung weiterer Methoden der Sensitivitätsanalyse und Interpretation von Ergebnissen; Abstimmung mit den Partnern in mehreren Video-Gesprächen. Beginn der Arbeiten zur Dokumentation Teil 2.
  - Weiterführung der Vergleichsrechnungen für ein Endlager im Salzgestein im internationalen Vorhaben DECOVALEX 2023, Task F. Diskussion und Interpretation von Ergebnissen der unterschiedlichen Institutionen in virtuellen Meetings. Teilnahme am 6. Workshop DECOVALEX D-2023 in Albuquerque.
  - Teilnahme am Meeting der Task Force EBS im September in Lund.
  - Teilnahme am Jahrestreffen der CatchNet-Gruppe im September in Stockholm.
  - Durchführung erster Einfrierversuche mit vereinfachten gedruckten Klüften.
  - Erste Modellrechnungen zur Tiefe der Temperatursignatur infolge eiszeitlicher Temperaturänderungen an der Oberfläche zeigen, dass die vereinfachten Zustandsgleichungen für höhere Temperaturen ausgelegt werden müssen.

#### 4. Geplante Weiterarbeiten

- TA 1:
- Teilnahme am RWMC Meeting, Fertigstellung des Berichts der Arbeitsgruppe TARGES und Initiierung von bzw. Mitarbeit in neuen Initiativen der IGSC.
  - Teilnahme an Sitzungen des EGAR-Bureaus, an den Arbeitstreffen von EGAR sowie am 3. IDKM und am 3. EGAR Plenary Meeting in Paris bzw. Wick.
  - Leitung eines Bureau Meetings (online) am 31.01.2023, Planung des CRC-6 Plenary Meetings im Mai 2023 in Korea, Weiterführung der Arbeiten gemäß PoW.
  - Moderation des Workshops „Human Intrusion Scenarios in Salt Repositories“ im Rahmen des Salt Clubs (online am 10.01. und 11.01.2023).
- TA 2:
- Weiterführung der Analyse von Modellsystemen verschiedener Länder im Rahmen der gemeinsamen Aktivität zur Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse (JOSA). Fertigstellung der Dokumentation Teil 2.
  - Weiterführung von Vergleichsrechnungen für ein Endlager im Salzgestein im internationalen Vorhaben DECOVALEX 2023. Teilnahme an virtuellen Meetings und am 7. Workshop DECOVALEX D-2023 in Busan/Korea.
  - Fortsetzung der Einfrierversuche mit vereinfachten gedruckten Klüften.
  - Entwicklung vereinfachter Zustandsgleichungen mit erweitertem Gültigkeitsbereich.
  - Fortsetzung der Modellrechnungen zur Talikbildung.
  - Teilnahme am Meeting der Task Force EBS im September in Lund.

#### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Capouet, M., Noseck, U., Smith, P.: Two decades of safety case development. Proceedings of the International High-Level Radioactive Waste Management Conference, Phoenix, 13-17 November 2022. doi.org/10.13182/T127-39214.

Becker, D.-A, Spiessl, M.: Advances in sensitivity analysis for repository performance assessment: Examples from the international JOSA exercise. Proceedings of the International High-Level Radioactive Waste Management Conference, Phoenix, 13-17 November 2022.

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> 02 E 11951A	
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Kompaktion von Salzgrus für den sicheren Einschluss – Phase 2 (KOMPASS-II)			
<b>Zuordnung zum FuE-Förderkonzept des BMWi 2021 - 2025:</b> FuE-Bereich 2: „Sicherheits- und Endlagerkonzepte; Endlagertechnik und (geo-)technische Barrieren“ und dort insbesondere das FuE-Feld: 2.3 „Geotechnische und technische Barrieren“			
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.07.2021 bis 30.06.2023		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2022 bis 31.12.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 298.800,00 EUR		<b>Projektleiter:</b> Larissa Friedenberg	

### 1. Vorhabenziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

### 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

#### AP 1: Experimentelle Untersuchungen

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

#### AP 2: Mikrostrukturelle Untersuchungen

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

#### AP 3: Numerische Modellierung

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

#### AP 4: Dokumentation und Synthese

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

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im Berichtszeitraum fanden drei Projektmeetings statt. Das erste Meeting fand im Rahmen der SaltMechX am 05.07.2022 als reines Präsenztreffen statt. Ebenfalls als reines Präsenzmeeting fand das nächste Treffen am 05.09.2022 in Braunschweig im Vorlauf zum US/German Workshop statt an dem auch die amerikanischen Kollegen in Persona teilnahmen. Auf beiden Meetings wurden die aktuellen Arbeitsstände besprochen und das weitere Vorgehen diskutiert. Das letzte Projektmeeting des Jahres fand am 30.11 und 01.12.2022 als Hybridveranstaltung in Leipzig statt. Schwerpunkt dieses Treffens war die Diskussion über die Nachfolge des KOMPASS-II Projekts, sowie die Zusammenarbeit mit dem SAVER Projekt. Neben den Projektmeetings fanden außerdem Interim-Meetings in Expertengruppen statt. Eine Expertengruppe befasst sich mit den Mikrostrukturuntersuchungen und die Zweite mit der numerischen Simulation. Die Interim-Meetings werden genauso wie die Projekttreffen von der Projektkoordinatorin GRS organisiert. Die Mikrostrukturexperten trafen sich im Berichtszeitraum am 09.08.2022 und am 11.10.2022 virtuell und diskutierten über das fachspezifische Vorgehen. Die Experten für die numerische Simulation trafen sich im Berichtszeitraum am 24.08.2022 und am 03.11.2022. Hier wurde vor allem die Vorgehensweise bei der Bearbeitung des Demonstrators diskutiert und Ergebnisse ausgetauscht. Die GRS als Projektkoordinatorin ist für die Organisation aller Meetings verantwortlich. Außerdem werden Arbeiten im Bereich der numerischen Simulation beigesteuert, welche im Berichtszeitraum vorrangig den Demonstrator betrafen. Im Rahmen der Kooperation mit SAVER wurde begonnen die Strecke für den KOMPASS Versatzkörper zu verfüllen. Die Projektkoordinatorin war hierbei mit im In-situ Einsatz.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Bearbeitung der einzelnen APs entsprechend der Vorhabenbeschreibung.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Friedenberg, L., Bartol, J., Bean, J., Czaikowski, O., Düsterloh, U., Gartzke, A.-K., Hangx, S., Laurich, B., Lerch, C., Lerche, S., Lüdeling, C., Mills, M., Müller-Hoeppe, N., Popp, T., Rabbel, O., Rahmig, M., Reedlunn, B., Nachinzoorig, S., Spiers, C., Svensson, K., Thiedau, J., van Oosterhout, B., Zemke, K., Compaction of Crushed Salt for the Safe Containment – Overview of the Phase 2 of the KOMPASS project. 3<sup>rd</sup> Conference in Key Topics in Deep Geological Disposal. Cologne, 04 – 06 July 2022.

Friedenberg, L., Bartol, J., Bean, J., Czaikowski, O., Düsterloh, U., Gartzke, A.-K., Hangx, S., Laurich, B., Lerch, C., Lerche, S., Lippmann-Pipke, J., Liu, W., Lüdeling, C., Mills, M., Müller-Hoeppe, N., Popp, T., Rabbel, O., Rahmig, M., Reedlunn, B., Rölke, C., Spiers, C., Svensson, K., Thiedau, J., van Oosterhout, B., Zemke, K., Zhao, J. Compaction of Crushed Salt for the Safe Containment – Overview of the Phase 2 of the KOMPASS project. 10th Conference on the Mechanical Behaviour of Salt (SaltMechX), Utrecht, July 6 – 8 2022.

Schaarschmidt, L., Friedenberg, L. Collaboration SAVER/KOMPASS. 12th US/German Workshop on Salt Repository Research, Design, and Operation. Braunschweig, 06. – 09.09.2022.

<b>Auftragnehmer:</b> BGE TECHNOLOGY GmbH, Eschenstraße 55, 31224 Peine		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11951B</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Kompaktion von Salzgrus für den sicheren Einschluss – Phase 2 (KOMPASS-II)		
<b>Zuordnung zum FuE-Förderkonzept des BMWi 2021 - 2025:</b> FuE-Bereich 2: „Sicherheits- und Endlagerkonzepte; Endlagertechnik und (geo-)technische Barrieren“ und dort insbesondere das FuE-Feld: 2.3 „Geotechnische und technische Barrieren“		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.07.2021 bis 30.06.2023	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2022 bis 31.12.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 263.890,83 EUR	<b>Projektleiter:</b> Lerch	

### 1. Vorhabenziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

### 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

#### AP 1: Experimentelle Untersuchungen

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

#### AP 2: Mikrostrukturelle Untersuchungen

Innerhalb von KOMPASS-I wurden mikrostrukturelle Methoden soweit vorangetrieben, dass eine Verknüpfung von Deformationsmechanismen und Kompaktion möglich ist. Ziele der mikrostrukturellen Untersuchungen sind zum einen in (AP 2.1) der Vergleich der Kornstruktur von experimentell vorkompaktierten Probekörpern mit in-situ kompaktiertem Material und somit die Verifizierung der Vorkompaktionsmethoden, sowie in (AP 2.2) die Untersuchung

von langfristig kompaktiertem Salzgrus. In (AP 2.3) soll zudem der Einfluss von Feuchtigkeit auf das Kompaktionsverhalten untersucht werden.

### **AP 3: Numerische Modellierung**

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

### **AP 4: Dokumentation und Synthese**

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

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

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

Die BGE TEC-Arbeiten konzentrierten sich auf AP 3. Anhand der Messergebnisse zum Versuch TUC V2 zeigte sich in AP 3.1, dass nur bei den thermischen Zustandsänderungen eine isolierte Betrachtung von Teilprozessen zur Anpassung der Laborergebnisse möglich ist. Die mechanische Zustandsänderung ist aufgrund ihrer Zeitdauer nicht nur durch das instantane elastische Deformationsverhalten geprägt, sondern weitere Teilprozesse des mechanischen Stoffmodells treten auf. Mit der Anpassung an den Versuch TUC V4 und seine Zusammenführung mit TUC V2 ist begonnen worden. Die Programmierarbeiten zur Anwendung von R wurden weiter fortgeführt.

Die Arbeit zur Stoffmodellentwicklung in AP 3.2 konzentrierte sich durch Bezug auf AP 3.1 auf die Integration einer transienten Phase im vorhandenen Deformationsmechanismus.

Für die Berechnungen mit dem Demonstrator in AP 3.3 wird das Verhalten des Wirtsgesteins in zwei unterschiedlichen Varianten beschrieben. Für diese Varianten sind Berechnungen an der vollverfüllten Strecke durchgeführt worden. Auftretende Instabilitäten wurden auf die Nähe der Anfangsporosität zur theoretischen initialen Porosität zurückgeführt. Berechnungen mit verbessertem Datensatz konnten dieses Verhalten beseitigen. Gleichzeitig konnte die in der Vergangenheit auftretende Diskrepanz gegenüber den Ergebnissen der Projektpartner so beseitigt werden.

## **4. Geplante Weiterarbeiten**

Die Anpassung der Laborexperimente wird fortgeführt und mit dem derart verbesserten Datensatz werden die Berechnungen des Demonstrators wiederholt. Ebenso werden die Teilstoffmodelle ergänzt und auf die Anpassung der Laborexperimente und den Demonstrator angewendet.

## **5. Berichte, Veröffentlichungen**

Das KOMPASS-II Projekt wurde auf der SaltMechX präsentiert und im Konferenzband „Mechanical Behaviour of Salt X“ veröffentlicht. Darüber hinaus wurde die Zusammenarbeit der Projekte SAVER und KOMPASS-II auf dem 12. US-German-Workshop vorgestellt.

<b>Auftragnehmer:</b> Institut für Gebirgsmechanik GmbH, 02479 Leipzig		<b>Förderkennzeichen:</b> 02 E 11951C	
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Kompaktion von Salzgrus für den sicheren Einschluss – Phase 2 (KOMPASS-II), Teilprojekt C			
<b>Zuordnung zum FuE-Förderkonzept des BMWi 2021 - 2025:</b> FuE-Bereich 2: „Sicherheits- und Endlagerkonzepte; Endlagertechnik und (geo-)technische Barrieren“ und dort insbesondere das FuE-Feld: 2.3 „Geotechnische und technische Barrieren“			
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.07.2021 bis 30.06.2023		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2022 bis 31.12.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 286.215,20 EUR		<b>Projektleiter:</b> Dr. Till Popp	

### 1. Vorhabenziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

### 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

Das Arbeitsprogramm gliedert sich in insgesamt in vier Arbeitspakete:

#### AP1: Experimentelle Untersuchungen

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

#### AP2: Mikrostrukturelle Untersuchungen

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

#### AP3: Numerische Modellierung

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

#### AP 4: Dokumentation und Synthese

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

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im Berichtszeitraum (2. Halbjahr 2022) führten die Projektpartner vier Projekttreffen durch, wovon zwei Treffen virtuell durchgeführt wurden („Gespräch Modellierung“ am 24.8.2022 und 3.11.2022) und zwei in Präsenz stattfanden (5.9.2022 in Braunschweig und 30.11-1.12.2022 in Leipzig).

In AP 1 wurden ein weiterer Kompaktionsversuch in der großen Versatzdruckzelle an befeuchtem Salzgrus (ca. 1 wt.-% H<sub>2</sub>O) mit Laststufen von ca. 0,5 MPa; 2,0 MPa, 4,0 MPa und 8,0 MPa durchgeführt (je Laststufe 1 Woche Kriechzeit). Dabei wurde in der letzten Belastungsstufe eine Restporosität von wenigen % erreicht. Allerdings zeigte sich in Vorversuchen, z.B. anhand von Dichtemessungen, dass die Kompaktion nicht gleichförmig ist, sondern im Bereich der Endflächen höher. Für die Verifizierung der Ergebnisse sind weitere Großversuche geplant.

Die neu konzipierte isostatische Kompaktionszelle wurde in Betrieb genommen und erste Tests durchgeführt. Dabei werden simultan die Volumenkompaktion, die Ultraschallgeschwindigkeiten in axialer Richtung von P- und S-Wellen sowie die Durchlässigkeit gemessen. Nach Kalibrierung des Systems werden Langzeitmessungen mit mehrmonatiger Standzeit durchgeführt.

Die Arbeiten des IfG für das AP 3 Numerische Modellierungen gliederten sich in zwei Teile. Erstens wurden die Ergebnisse der Referenzrechnungen des virtuellen Demonstrators von allen Partnern zusammengetragen und vergleichend analysiert. Zweitens wurde basierend auf Basis des erweiterten Langzeitkompaktionsversuchs TUC-V2 der TU Clausthal die Parameteranpassung des Salzgrus-Stoffmodells aktualisiert und dadurch verbessert.

Die Analyse der Ergebnisse des Demonstrators zeigte eine große Bandbreite der berechneten Kompaktionskurven, trotz Anpassung an denselben Referenzversuch (TK-031 der BGR). Diese liegen einerseits in der unterschiedlichen Modellformulierungen begründet, andererseits aber auch im unzureichenden Validierungsstatus, da entsprechende Laboruntersuchungen noch in Arbeit bzw. Vorbereitung sind. Ein Vergleich der modellierten in-situ Bedingungen im Demonstrator mit den vom Referenzversuch abgedeckten Bedingungen ergab insbesondere, dass die Validierung im Bereich hoher (> 15%) sowie sehr niedriger (< 8%) Porositäten fehlt, und auch der Einfluss von Spannungsdeviatoren nicht gut beschrieben ist. In den unzureichend validierten Parameterbereichen unterscheiden sich die volumetrischen Kompaktionsraten teilweise um mehrere Größenordnungen. Als Ziel wurde daher eine verbesserte Parameteranpassung an neue Versuche formuliert, um diese Defizite zu reduzieren.

Die Anpassung an den Kompaktionsversuch TUC-V2 war dabei der erste Schritt. Dieser wurde mit dem KOMPASS Referenzmaterial durchgeführt, womit eine Kalibrierung auf sehr niedrige Porositäten (ca. 3%) und Deviatorspannungen möglich war. Das IfG hat diese Anpassung sowie eine Nachrechnung von TUC-V2 als Benchmark erfolgreich durchgeführt. Die Ergebnisse wurden den Projektpartnern zur Verfügung gestellt.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Bearbeitung der einzelnen APs entsprechend der Vorhabenbeschreibung.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

keine

<b>Auftragnehmer:</b> TU Clausthal - Lehrstuhl für Geomechanik und multiphysikalische Systeme		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11951D</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Kompaktion von Salzgrus für den sicheren Einschluss – Phase 2 (KOMPASS-II)		
<b>Zuordnung zum FuE-Förderkonzept des BMWi 2021 - 2025:</b> FuE-Bereich 2: „Sicherheits- und Endlagerkonzepte; Endlagertechnik und (geo-)technische Barrieren“ und dort insbesondere das FuE-Feld: 2.3 „Geotechnische und technische Barrieren“		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.07.2021 bis 30.06.2023	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2022 bis 31.12.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 307.503,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> apl. Prof. Dr.-Ing. habil. Uwe Düsterloh	

### 1. Vorhabenziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

### 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

#### AP 1 Experimentelle Untersuchungen

AP1.1 Weiterentwicklung der Vorkompaktionstechniken

AP1.2 Demonstration der hydraulischen Integrität

AP1.3 Durchführung von Langzeit-Kompaktionsversuchen

#### AP 2 Mikrostrukturelle Untersuchungen

AP2.1 Verifizierung von Vorkompaktionsmethoden

AP2.2 Bewertung von langzeitkompaktierten Proben

AP2.3 Einfluss der Feuchtigkeit auf das Verformungsverhalten

AP2.4 Bewertung von Proben aus Permeabilitätsmessungen

#### AP 3 Numerische Modellierung

AP3.1 Benchmark-Berechnungen auf Basis der Laborexperimente

AP3.2 Modellentwicklung und - Optimierung

AP3.3 Demonstrator

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

#### AP 4 Dokumentation und Synthese

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

#### AP 1 Experimentelle Untersuchungen

##### AP1.1 Weiterentwicklung der Vorkompaktionstechniken

- Fortsetzung von systematischen Untersuchungsreihen – Versuchsserie mit Variation des Feuchtegehaltes bei gleichbleibenden Belastungsbedingungen.

##### AP1.2 Demonstration der hydraulischen Integrität

- Erneute Untersuchung des *Permeabilitätsverhaltens* der langzeitkompaktierten Proben TK-033 und TK-031 von BGR sowie des Prüfkörpers TUC-V2 von TUC in einer modernisierten Versuchsanlage.

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

- Finale Auswertung des Langzeitkompaktionsversuchs TUC-V4 mit variierten deviatorischen Belastungen und Übergabe der Messdaten an *Projektpartner* zur Verwendung für *Benchmark-Analysen*.
- Durchführung der Vorversuche TUC-V5-Test und TUC-V5-Test2 zur Überprüfung und Ertüchtigung der Anlagenmesstechnik für die Messung der Kompaktion für einen Salzgrusprüfkörper mit hoher Anfangsporosität. Zielsetzung: Feststellung/Konkretisierung der funktionalen Abhängigkeit des Kompaktions-verhaltens im wenig laborativ belegten Bereich hoher Porosität im Rahmen von Langzeituntersuchungen.

**AP 3 Numerische Modellierung****AP3.2 Modellentwicklung und – Optimierung**

- Optimierung des Ansatzes für die Abhängigkeit des Kompaktionsverhaltens von der Temperatur.
- Analyse der Messdaten aus allen fünf Phasen des Versuchs TUC-V2 und darauf aufbauende Ermittlung der Materialparameter für das KOMPASS-Material zur weiteren Anwendung in numerischen Untersuchungen.

**AP3.3 Demonstrator**

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

- Variation mit und ohne Eigengewicht für Salzgrus zum Nachweis der Ursache für die Firstspaltbildung.

**AP3.4 Bewertung der numerischen Modelle in Bezug auf die Anforderungen in der Langzeitsicherheitsanalyse****4. Geplante Weiterarbeiten****AP 1 Experimentelle Untersuchungen****AP1.1 Weiterentwicklung der Vorkompaktionstechniken**

Fortsetzung der systematischen Untersuchungsreihe mit Variation des Feuchtegehalts.

**AP1.2 Demonstration der hydraulischen Integrität**

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

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

- Auswertung der Vorversuche TUC-V5-Test und TUC-V5-Test2 zur Überprüfung der Funktionsfähigkeit der Anlagenmesstechnik sowie der Eignung der ausgewählten Belastungsniveaus.

**AP 3 Numerische Modellierung****AP3.1 Benchmark-Berechnungen auf Basis der Laborexperimente**

- Zusammenführung und vergleichende Darstellung der Berechnungsergebnisse der Verbundpartner für die Backanalyse des Versuchs TUC-V2.

**AP3.3 Demonstrator**

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

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

- Analyse der Berechnungsergebnisse der Verbundpartner für die Backanalyse des Versuchs TUC-V2 im Hinblick auf eine Bewertung der Plausibilität der Ergebnisse sowie der Funktionalität der angewendeten Materialmodelle.

**5. Berichte, Veröffentlichungen**

U. DÜSTERLOH, U., LERCHE, S.: The transition from soil to rock – A constitutive model for the physical characterization of the genesis of rock salt from crushed salt. Poster for 33th ALERT Workshop and School, Aussois, 26th September to 1st October 2022.

<b>Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer:</b> Technische Universität Bergakademie Freiberg, Akademiestr. 6, 09599 Freiberg		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11961</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Entwicklung eines salzgrusbasierten Versatzkonzeptes unter der Option Rückholbarkeit – Phase 1 (SAVER)		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerkonzepte und Endlagertechnik		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.07.2021 bis 30.06.2023	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2022 bis 31.12.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 554.503,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr.-Ing. Mischo	

## 1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

## 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

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

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

**AP1:** Das Messkonzept wurde an GESAV II orientiert und zum größten Teil übernommen. (AP1.1). Die Feuchtigkeitsmesssensoren wurde mit Hilfe des Herstellers auf alle drei zu verwendenden Materialien (GESAV-Material, KOMPASS-Material, qualifizierter Salzgrus) kalibriert. Der Einbau des Messequipments in der Grube Sondershausen ist komplett abgeschlossen (AP1.2). Für die Attrappe des POLLUX-Behälters wurden Vortriebsrohre von der Firma HOBAS bezogen. Diese entsprechen vom Durchmesser den POLLUX-Behältern und bieten ausreichende Stabilität, um als Dummies zu fungieren (AP1.3). Die Attrappen wurden hinsichtlich ihrer Länge zugeschnitten und zu den untertägigen Versuchsorten transportiert. Die Attrappe, welche sich im KOMPASS-Querschlag befindet ist bereits komplett versetzt. Die Attrappe im Querschlag, in dem das patentierte GESAV-Material verwendet wird, wird planmäßig im Februar versetzt.

**AP2:** Alle Salzbinderkomponenten wurden geliefert und einer eingänglichen Qualitätsprüfung unterzogen, welche ohne Mängel bestanden wurde (AP2.1). Eine Notwendigkeit der Anpassung bzw. Verbesserung der GESAV-Rezeptur wurde bereits im letzten Zwischenbericht ausgeschlossen (AP2.2).

**AP3:** Die Errichtung des Versatzkörpers aus angefeuchtetem Salzgrus wurde erfolgreich abgeschlossen (AP3.1). Der Körper wurde sowohl mit Probebehältern ausgestattet, welche beim Rückbau geborgen werden, als auch Probebehältern, welche direkt beim Einbauprozess geborgen wurden. Diese Probebehälter bestehe aus 100 mm bis 150 mm langen KG-Rohren und sollen Erkenntnisse über erzielbare Einbaudichten liefern. Das Material lies sich nach aktuellem Stand sehr gut und gezielt schleudern. Die Effektivität der Verdichtung wird durch die Proben überprüft.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

**AP1:** Keine Weiterarbeiten nötig. Es müssen lediglich wie üblich beim Einbau der Versatzkörper, die Sensoren eingeschaltet und in Position gebracht werden (AP1.1)

**AP2:** Die Versatzkörper werden nach Herstellung weiterhin kontinuierlich in regelmäßigen Abständen beprobt und geochemisch analysiert (AP 2.1).

**AP3:** Die Versatzkörperherstellung mit dem GESAV-Material wird im Ende Januar 2023 begonnen und vermutlich Anfang Februar 2023 abgeschlossen (AP3.2)

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

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

Vorstellung SAVER-Projekt bei US/German Workshop

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

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

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

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Technische Universität Bergakademie Freiberg, Akademiestr. 6, 09599 Freiberg	<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11971A</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Anwendbarkeit von Niedertemperatur-Salzschmelzen für Verschlussmaßnahmen von Endlagern für radioaktive Abfälle im Wirtsgestein Salz (SalVE), Teilprojekt A	
<b>Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Endlagerforschung</b> Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte; Endlagertechnik und (geo-)technische Barrieren; Felder C2.2 und C2.3	
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.08.2021 bis 31.01.2024	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2022 bis 31.12.2022
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 457.118,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Daniela Freyer

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Hauptziel des Vorhabens besteht darin, die Möglichkeit einer Anwendung von Salzschmelzensystemen (SSS) für Verschlusskomponenten in einem Endlager in Steinsalz zu prüfen und ggf. konkrete Konzepte dafür herzuleiten. Der Einsatz ist in Bezug auf die Betriebsphase, eine eventuelle Rückholung, und den langzeitlichen, sicheren Einschluss zu prüfen, aber auch übergreifend zu betrachten. Als Teilziele folgen daraus: Anforderungen an die SSS sind zu formulieren und bekannte Vertreter hinsichtlich ihrer Eignung zu bewerten. Mit Hilfe von Versuchen im Liter-Maßstab sind Verarbeitungs-, Erstarrungs- und Reaktionsverhalten zu untersuchen sowie ein Einbringkonzept für den untertägigen Einsatz zu entwickeln. Abschließend sind Planungshinweise für eventuelle weitergehende Demonstrationsversuche zu formulieren. Bei dem Vorhaben handelt es sich um Verbundprojekt zwischen TUBAF (mit dem IfG Leipzig als Unterauftragnehmer) und BGE TECHNOLOGY GmbH (FK 02E11971B)

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Erarbeiten der Anforderungen und Randbedingungen
  - AP2: Datenzusammenstellung, Literatursichtung relevanter Salzschmelzensysteme
  - AP3: Präzisierung der geologisch/technologischen und thermischen Randbedingungen für die vorausgewählten Endlagerkonzepte im Steinsalz
  - AP4: Auswahl in Frage kommender Salzschmelzen für die identifizierten Randbedingungen
  - AP5: Überprüfung der Einsatzfähigkeit von Salzschmelzen unter den Bedingungen eines Endlagerbergwerkes
  - AP6: Handhabungsversuche an positiv befundenen Salzschmelzen
  - AP7: Ableitung von Empfehlungen zur Anwendbarkeit ausgewählter Salzschmelzen in einem HAW Endlagerbergwerk und zur Durchführung weiterer Forschungsarbeiten
  - AP8: Dokumentation und Berichterstattung
- Die Arbeitspakete 1, 3, 4, 5, 7 und 8 werden gemeinschaftlich bearbeitet, AP2 und AP6 ohne Beteiligung des Verbundpartners.

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP4: Für die beiden favorisierten Salzschnmelzenmischungen NaCl (50,5 mol%)-AlCl<sub>3</sub> (49,5 mol%) und KCl (34 mol%)-CuCl (66 mol%) wurden relevante Eigenschaften hinsichtlich ihrer Bekanntheit aus der Literatur bewertet und konkrete experimentelle Untersuchungen abgeleitet. Die Dokumentation des Auswahlprozesses wurde abgeschlossen.

AP6: Es wurden Handhabungsversuche zur optimalen Vermischung von NaCl-AlCl<sub>3</sub>-Schmelze mit Steinsalzgrus durchgeführt und eine standardisierte Prozedur zur Herstellung solcher Prüfkörper entwickelt. An den NaCl-AlCl<sub>3</sub>-Steinsalz-Prüfkörpern wurden geomechanische Untersuchungen durchgeführt. Die Festigkeit ist gegenüber Prüfkörpern der reinen Schmelze deutlich größer und die Gaspermeabilität ist niedriger, sodass diese Modifizierung der Schmelze mit Steinsalzgrus positiv zu bewerten ist.

Die Oberflächen von Bruchstücken der erstarrten NaCl-AlCl<sub>3</sub>-Schmelze (mit und ohne Steinsalzgrus) wurde mittels PXRD sowie REM/EDX untersucht. Hierbei zeigte sich eine schnelle Zersetzung von NaAlCl<sub>4</sub> zu NaCl und AlCl<sub>3</sub>(Hydrat) durch Luftfeuchte. Die erstarrten Schmelzkörper zeigen bis zu 2 µm breite Risse.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

AP1: Ableitung nachzuweisender Eigenschaften und Entwicklung eines Grobkonzepts zur geotechnischen Nachweisführung für den modellbasierten Beleg der Funktionsfähigkeit (IfG) in Abstimmung mit BGE TECHNOLOGY. Formulierung des Verbesserungspotentials durch den Einsatz von Salzschnmelzen an den identifizierten Lokationen gegenüber anderen Materialien.

AP3: Szenarienableitung zur Temperaturentwicklung am Einsatzort und zu thermomechanischen Einwirkungen auf Verfüllbereiche sowie an Kontaktbereichen Schmelze/Salz/Abchlusspfropfen (IfG)

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

AP6: Es sind Anströmversuche mit gesättigter NaCl-Lösung auf Probekörper aus erstarrter NaCl-AlCl<sub>3</sub>-Schmelze mit und ohne Salzgrus geplant, um Aussagen zur Durchlässigkeit von Lösungen treffen zu können.

Die Ursache der Rissbildung an Bruchstücken erstarrter Schmelzkörper soll geklärt werden.

Das Anbindeverhalten der erstarrten KCl-CuCl-Schmelze an Steinsalz soll untersucht werden.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Konferenzbeitrag: Keller, Andreas; Rincke, Christine, Naumann, Dirk, SalVE – Identifying a molten salt mixture used to strengthen EBS, US/GERMAN Workshop Salt Repository Research, Design & Operation, 08.09.2022, Braunschweig

<b>Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer:</b> BGE TECHNOLOGY GmbH, Eschenstr. 55, 31224 Peine		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11971B</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundvorhaben: Anwendbarkeit von Niedertemperatur-Salzschmelzen für Verschlussmaßnahmen von Endlagern für radioaktive Abfälle im Wirtsgestein Salz (SalVE), Teilprojekt B		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerforschung</b> Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte; Endlagertechnik und (geo-)technische Barrieren; Felder C2.2 und C2.3		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.08.2021 bis 31.01.2024	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2022 bis 31.12.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 119.416,50 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Andreas Keller	

## 1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

## 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

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

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

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im dritten Berichtszeitraum fand ein Projektgespräch statt.

- AP1: Formulierung des Verbesserungspotentials durch den Einsatz von Salzschnmelzen an den identifizierten Lokationen gegenüber anderen Materialien. Insbesondere ist von Vorteil, wenn das Dichtelement als Demonstrationsbauwerk geprüft werden kann und so Unsicherheiten abgestellt werden. Daneben ist eine vollständige Füllung des Hohlraumes angestrebt, die zu einer frühen Verheilung der ALZ führt. Schließlich sollen eine geringe Permeabilität des Dichtelementes und eine gute Anbindung an das Gebirge für eine gute Abdichtung sorgen.
- AP3: Detaillierte Beschreibung der vorgesehenen Einsatzorte bezüglich Geometrie, Bewetterung und Entfernungen zur Tagesoberfläche bzw. zu der Gestalt des Endlagers zu diesen Zeitpunkten.
- AP5: Prüfung der Zulassungsfähigkeit in Anbetracht der Kombination aus SSS und Verwendung. Variantenstudie zur Positionierung des Schmelzofens (über Tage/unter Tage) und zum Transport der Schmelze bzw. ihrer Komponenten aufbauend auf der Ideenskizze zur Einbringung in Zusammenarbeit mit der TU Bergakademie Freiberg. Es wurde ein Workshop zur Bestimmung der offensichtlichen Gefahren der verschiedenen Einbringungstechnologien durchgeführt. Daraus folgt die Vorzugsvariante mit mobiler Technik. Dazu gehören Thermobehälter die von Flurförderfahrzeugen zu einem beliebigen Einbringungsort transportiert werden können. Die Aufstellung des Heizers ist zumindest für eine Schachtabdichtung nötig, kann aber zeitweise für z.B. die Streckenverschlüsse zusätzlich auch untertage erfolgen. Es erfolgte eine Befahrung des ERA Morsleben zur Sammlung von Betriebserfahrungen mit heißen Flüssigkeiten (Bitumen/Asphalt) untertage. Die gesichteten Unterlagen legen nahe, dass ein sicherer Betrieb auch für die SSS möglich ist.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- AP5: Anwendung der Regelungen zum Einsatz von Gefahrenstoffen am Beispiel der gewählten SSS. Beschreibung von Möglichkeiten der Einbringung als Basis für thermomechanische Rechnungen. Detaillierte Beschreibung der Prozesskette zum Einbau von SSS.
- AP6: Unterstützung bei der Versuchsplanung und der weiteren Vorgehensweise.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Konferenzbeitrag: Keller, A.; Rincke C.; Naumann, D.: SalVE – Identifying a molten salt mixture used to strengthen EBS – Application areas, basic requirements and the selection process. In: 12th US/German Workshop on Salt Repository Research, Design, and Operation. 08.09.2022.

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> 02 E 11981A	
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Implementierung eines Monitoringsystems zur Evaluierung der Korrosionsvorgänge an Behältermaterialien in Bentonit-basierten Endlagerkonzepten (IMKORB), Teilprojekt A			
<b>Zuordnung zum FuE-Förderkonzept des BMWi 2015 - 2018:</b> FuE-Bereich C Endlagerforschung, C3 Sicherheitsnachweis, C3.1 Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-)Phänomene und Prozesse zugeordnet (siehe BMWi-Forschungsförderung zur nuklearen Sicherheit, 2021-2025).			
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.08.2021 bis 31.07.2024		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2022 bis 31.12.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 813.471,50 EUR		<b>Projektleiter:</b> PD Dr. habil. Andrés G. Muñoz	

## 1. Vorhabenziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

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

## 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

Im Einzelnen werden folgende Teilziele verfolgt

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

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

#### Elektrochemische Untersuchungen (AP 1.1)

Der erste Versuch einer Serie von geplanten Langzeitkorrosionsexperimenten von GGG40 wurde wiederholt. Dabei wird das zu untersuchende Material für 3 Monate in Kontakt mit gesättigtem Bentonit bei 30°C in einer sogenannten Bentonit-Zelle gehalten. Polarisationskurven wurden in regelmäßigen Abständen aufgenommen. Schwerpunkt bei diesem Experiment ist die Beobachtung der Korrosionsentwicklung in einem mit Sauerstoff untergesättigten, leicht gepressten Bentonit-Porenwasser-Suspension, was den ersten Stadien der Korrosion in Ton-Endlager-Konzepten entsprechen soll. Aus den Polarisationskurven lassen sich kinetische Parameter der anodischen Auflösung ableiten, die in Kombination mit den im vorherigen Experiment gemessenen Werten des Polarisationswiderstands, für die Berechnung der zeitlichen Entwicklung der Korrosionsgeschwindigkeit benutzt werden.

SEM-EDX und XPS-Spektren der von Bentonit befreiten korrodierenden Stahloberfläche sind analysiert worden. Ähnlich wie bei den verwandten Experimenten in Opalinus-Porenwasser, hat man hier die Bildung einer Schicht aus Eisensilikat an der Stahlfläche im Übergang zu den Bentonit-Partikeln nachgewiesen. TEM-EDX Analysen auf einem Querschnitt am Übergang von Graphitkugel zu Stahlmatrix haben ebenfalls eine zum Teil gehaftete Schicht aus Silica and Eisensilikat gezeigt.

Die Sensorik der Pt-Miniatur-Elektrode nah an der korrodierenden Oberfläche wurde evaluiert auf der Basis von vergleichsweisen Voltametrien in Porenwasser. Die Antwort des Sensors deutet auf eine Limitierung des Sauerstofftransport zur korrodierenden Oberfläche hin. Darüber hinaus wird ein Aufladungsprozess im Potentialbereich für die Pt-Oxid-Bildung gezeigt, der einer Ladungsakkumulation im Bentonit zuzuschreiben ist.

Ein neuer Entwurf für eine kleinere, elektrisch geheizte und für kürzere Experimente entworfene Bentonit-Zelle ist im Aufbau. Diese Zelle eignet sich zu einer beschleunigten Evaluierung des Korrosionsverhaltens von Materialien im Kontakt mit leicht kompaktiertem gesättigtem Bentonit.

#### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Inbetriebnahme des vor kurzem angeschafften elektrochemischen Rastermikroskops.
- Auswertung der Langzeitexperimente der Korrosion von GGG40 in gesättigtem Bentonit bei 50°C.
- Verfeinerung einiger Polarisationsexperimente mit Blick auf ihre Veröffentlichung.
- Durchführung der etwas verzögerten systematischen Korrosionsstudien von CuNi30Mn1Fe in 2.0882 in Porenwasser.
- Auswertung der Oberflächenanalyse ausgewählter Proben (SEM-EDX und XPS-Spektren)
- Publikation der ersten Ergebnisse zu Korrosion von GGG40 in Porenwasser

#### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine in diesem Zeitraum.

<b>Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer:</b> Karlsruher Institut für Technologie (KIT) Institut für Nukleare Entsorgung (INE)		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11981B</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Implementierung eines Monitoringsystems zur Evaluierung der Korrosionsvorgänge an Behältermaterialien in Bentonit-basierten Endlagerkonzepten (IMKORB), Teilprojekt B.		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Das Vorhaben ist dem FuE-Bereich C Endlagerforschung, C3 Sicherheitsnachweis, C3.1 Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-)Phänomene und Prozesse zugeordnet.		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.08.2021 bis 31.07.2024	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2022 bis 31.12.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 459.413,62 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Finck	

## 1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

## 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

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

AP 3: Laboruntersuchungen der Korrosion von Stahlcoupons in Bentonit

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

AP 6: Dokumentation und Publikation

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

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

**AP 3:** Die Korrosionsexperimente unter statischen Bedingungen bei Raumtemperatur (RT) und 50°C mit 3 Monaten Reaktionszeit wurden beendet. Nach Abkühlung wurden in den Experimenten pH und Redoxpotentiale in-situ gemessen, bevor der Coupon und das zentrifugierte Grundwasser chemisch analysiert wurden. Die in-situ gemessenen pH-Werte liegen leicht (<0.5 pH) unter dem Wert aus dem Blindexperiment ohne Coupon. Niedrige Werte wurden in Experimenten bei 50°C gemessen. In Experimenten mit Feinkornbaustahl liegen die Redoxpotentiale bei ca -375 mV (vs S.H.E). Für dieses Material zeigt die Korrosionsrate eine starke Temperaturabhängigkeit, mit 3 µm/a bei RT und 27 µm/a bei 50°C. Für beide untersuchten Werkstoffe wurde eine neue Serie mit 6 Monaten Reaktionszeit unter ähnlichen Randbedingungen vorbereitet und angesetzt. Der Versuchsaufbau von Experimenten unter dynamischen Bedingungen wurde etabliert und getestet.

Der Versuchsaufbau für elektrochemische Untersuchungen wurde etabliert und Vorversuche mit dem Feinkornbaustahl durchgeführt.

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

**AP 6:** Keine Arbeiten innerhalb des Berichtszeitraums.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

**AP 3:** Nach Beendigung der Experimente unter statischen Bedingungen mit 6 Monaten Reaktionszeit sollen die Proben charakterisiert werden, insbesondere hinsichtlich der Zusammensetzung des Porenwassers, der Charakteristika des Coupons, und der Korrosionsrate. Um die Prozesse besser abbilden zu können, soll eine dritte Experimentserie bei Raumtemperatur vorbereitet werden, mit ca. 9 Monaten Reaktionszeit. Erste Experimente unter dynamischen Bedingungen mit einer Reaktionszeit von 3 Monaten (Raumtemperatur und 50°C) sollen vorbereitet und begonnen werden.

Die elektrochemischen Experimente sollen fortgesetzt werden. Coupons, die in Bentonitsuspension vorkorrodieren, sollen mit elektrochemischen Methoden analysiert werden. Es erfolgt eine Modellierung der experimentellen Daten.

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

**AP 6:** Es sind im nächsten Halbjahr keine Arbeiten hierzu geplant.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

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

<b>Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer:</b> Leibniz Universität Hannover		<b>Förderkennzeichen:</b> 02 E 11981C	
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundvorhaben: Implementierung eines Monitoringsystems zur Evaluierung der Korrosionsvorgänge an Behältermaterialien in Bentonitbasierten Endlager-Konzepten (IMKORB), Teilprojekt C			
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Nukleare Entsorgungsforschung			
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.08.2021 bis 31.07.2024		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2022 bis 31.12.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 588.972,74 EUR		<b>Projektleiter:</b> 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**

Im zweiten Halbjahr 2022 wurden die Arbeiten zur Materialcharakterisierung gemäß Arbeitspunkt 2 weiter fortgeführt. Nachdem die Proben der verschiedenen Materialien im Vorfeld bereits zugeschnitten, eingebettet, präpariert und metallographisch untersucht wurden, wurden weitere Untersuchungen zur Korngrößenbestimmung durchgeführt und die Ergebnisse mit der Literatur abgeglichen. Hierzu wurde eine Literaturrecherche durchgeführt, bei der der Fokus auf der Ableitung von Korrosionseigenschaften anhand der Gefügedaten lag. Bei den untersuchten Werkstoffen wurde eine recht große Spanne an Korngrößen festgestellt, die jedoch innerhalb eines Werkstoffs relativ einheitlich ausfiel. Das Gusseisen hatte bei den Untersuchungen mit einer Korngrößenzahl von 7 das größte Korn, der Federstahl mit einer Korngrößenzahl von 13 das feinste. Die Korngröße gibt dabei ein Indiz auf die Korrosionseigenschaften, da die größere Fläche an Korngrenzen bei feinem Korn zu einer Beschleunigung von Korrosionsvorgängen führen kann. Ein weiterer Punkt, der betrachtet wurde, war das Auftreten von Lokalelementen, die bei Ausscheidungen oder mehrphasigen Systemen auftreten können. Hierbei tritt Korrosion aufgrund unterschiedlicher Elektronegativität auf. In den untersuchten Materialien konnte nur beim Federstahl solche Lokalelemente festgestellt werden. Hier zeigten sich kleine Ausscheidungen, die Al, Mg und Ca enthalten und von hellen Höfen mit erhöhtem Si-Gehalt umgeben sind. Als letzter Punkt wurde das ausgebildete Gefüge selbst betrachtet und die Korrosionsneigung anhand von Materialspannungen abgeschätzt. Bei den betrachteten Materialien ist auch hier der Federstahl als einziges Beispiel zu nennen, da dieser als einziges Material über Martensit als Härtegefüge verfügt. Bei der Bewertung des Korrosionsverhaltens der Werkstoffe konnte daher nur für den Federstahl ein schlechteres Verhalten bei korrosiven Angriff prognostiziert werden.

Neben den metallographischen Untersuchungen wurden auch Versuche zur Röntgenbeugung durchgeführt. Hierdurch sollten mögliche Texturen als Folge der Herstellungsprozesse identifiziert und genauer untersucht werden. Bei den Proben aus Gusseisen und dem Feinkornbaustahl konnten keine Texturen identifiziert werden, die Körner liegen hier regellos verteilt. Beim Federstahl konnte eine Fasertextur festgestellt werden, Anhand der Literatur lässt sich hierdurch jedoch nicht auf ein eingeschränktes Korrosionsverhalten schließen. Im Fall des untersuchten Austenits konnte eine teilweise Würfeltextur identifiziert werden. Eine solche Orientierung wird jedoch mit einem verbesserten korrosiven Widerstand in Verbindung gebracht. Eine ebenfalls positive Auswirkung der Textur konnte auch beim Zirkonium festgestellt werden. Hier wurde eine starke Texturierung festgestellt, bei der nicht nur eine, sondern zwei der Flächen der hexagonalen Körner eine Vorzugsorientierung aufweisen, wodurch die Körner nahezu gleich im Material liegen. Eine solche Orientierung kann sich ebenfalls positiv auf den Widerstand gegen Korrosion auswirken. In den Untersuchungen wurde nur für den Kupfer-Nickelwerkstoff eine mögliche Einschränkung auf die Korrosion festgestellt. Bei diesem Werkstoff liegt eine dominante Orientierung vor, die zu schlechteren korrosiven Eigenschaften führen kann.

Um die anhand von metallographischen und röntgenographischen Untersuchungen abgeschätzten Auswirkungen auf die Korrosionseigenschaften zu validieren, wurden im Anschluss einfache elektrochemische Untersuchungen zur Ermittlung der Korrosionsraten unter gleichen Bedingungen mit einem EC-Pen durchgeführt.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

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

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

Keine

<b>Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer:</b> TU Clausthal - Lehrstuhl für Geomechanik und multiphysikalische Systeme		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11991</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Entwicklung und Validation einer neuartigen Versuchstechnik für triaxiale Kriechversuche bei geringer deviatorischer Belastung (KRIECHTECH)		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Bereich C1: Standortauswahl, Feld 1.2		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2021 bis 30.09.2024	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2022 bis 31.12.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 304.468,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> apl. Prof. Dr.-Ing. habil. Uwe Düsterloh	

## 1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

## 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

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

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

**AP1:** Fertigstellung der drei Triaxialzellen abgeschlossen

**AP2:** Inbetriebnahme und Kalibrierung der Prüfstände konnte aufgrund coronabedingter Lieferverzögerungen noch nicht realisiert werden

**AP3:** -

**AP4:** Diskretisierung ausgewählter Tragsysteme

### 4. Geplante Weiterarbeiten

**AP1:** -

**AP2:** Kalibrierung und Inbetriebnahme der Prüfstände und der zugehörigen Mess- und Regelungssoftware

**AP3:** Durchführung und Auswertung von Triaxialversuchen

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

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

-

<b>Auftragnehmer:</b> Karlsruher Institut für Technologie (KIT) - Kompetenzzentrum für Materialfeuchte, 76128 Karlsruhe		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 12001A</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundvorhaben: Sandwich Support Projekt 1: Heterogene Bentonithydratation (Sandwich-SP1), Teilprojekt A		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> C: Endlagerung; C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte; C2.3 Geotechnische und technische Barrieren		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.12.2021 bis 30.11.2024	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2022 bis 31.12.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 323.058,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Katja Emmerich	

### 1. Vorhabenziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

### 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

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

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

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

AP4: Koordination/Berichtswesen (KIT)

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

**AP1:** Die mineralogische Grundcharakterisierung beider Bentonite wurde begonnen und mit den Daten der Materialbatches aus dem Sandwich-HP (02E11799A/B/C) verglichen. Es wurde ein etwas höherer Quarzgehalt im Calcigel und eine etwas niedrigere KAK für beide Bentonite beobachtet. Die Herstellung der homoionischen Teilproben beider Bentonite wurde begonnen. Dafür wurden beide Bentonite entcarbonatisiert und mit Chloridlösungen der Kationen  $\text{Na}^+$ ,  $\text{K}^+$ ,  $\text{Ca}^{2+}$  und  $\text{Mg}^{2+}$  behandelt. Derzeit läuft die Dialyse zur Entfernung überschüssiger Ionen.

Die  $\mu\text{CT}$  geeigneten Quelldruckzellen wurden in Betrieb genommen und es wurden erste Quelldruckversuche mit den Rohbentoniten im Anlieferungszustand sowie  $< 250 \mu\text{m}$  aufgemahlen durchgeführt. Die gemessenen Quelldrücke liegen bei gleicher Trockendichte und Wassergehalt im Bereich der Quelldrücke, welche mit klassischen Oedometern bestimmt werden, sind aber etwas höher.

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

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

**AP4:** Es wurde ein Projektmeeting bzgl. der Variation der mineralogischen und geotechnischen Materialkennwerte im Vergleich zu den Materialbatches aus dem Sandwich-HP sowie bzgl. der ersten Ergebnisse zu den Quelldruckversuchen durchgeführt. Der Projektstand wurde zudem in einem gemeinsamen Projekttreffen mit dem Sandwich-HP (02E11799A/B/C) präsentiert und diskutiert.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

**AP1:** Abschluss der Grundcharakterisierung beider Bentonitebatches inkl. Schichtladung und Bestimmung der lateralen Dimension der quellfähigen Tonminerale im Secursol UHP, Abschluss der Herstellung homoionischer Teilproben; systematische Untersuchungen in den  $\mu\text{CT}$  Quelldruckzellen zum Einfluss der Probengeometrie (Variation d:h)

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

keine

<b>Auftragnehmer:</b> Ruhr-Universität Bochum (RUB) – Lehrstuhl für Bodenmechanik, Grundbau und Umweltgeotechnik, 44780 Bochum		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 12001B</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundvorhaben: Sandwich Support Projekt 1: Heterogene Bentonithydratation (Sandwich-SP1), Teilprojekt B		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> C: Endlagerung; C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte; C2.3 Geotechnische und technische Barrieren		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.12.2021 bis 30.11.2024	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2022 bis 31.12.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 268.932,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr.-Ing. Wiebke Baille	

### 1. Vorhabenziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

### 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

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

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

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

AP4: Koordination/Berichtswesen (KIT)

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

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

**AP2:** Die geotechnische Klassifizierung der beiden im Projekt verwendeten Bentonit-Granulate 0-4 mm (Calcigel und SecursolUHP) wurde durchgeführt. Die Korngrößenverteilung der Granulate wurde bestimmt. Beide Korngrößenverteilungen sind nahezu identisch. Hinsichtlich der Plastizitätseigenschaften zeigte Calcigel infolge der höheren Fließgrenze ( $w_{L,Calcigel} = 117\%$ ,  $w_{L,SecUHP} = 93\%$ ,) eine etwas höhere Plastizitätszahl  $I_p = 83\%$  im Vergleich zu der für SecUHP bestimmten ( $I_p = 58\%$ ). Es wurde jeweils eine Versuchsserie an volumenkonstanten Quelldruckversuchen an homogenen, statisch verdichteten Proben mit Variation der initialen Trockendichte an beiden Bentoniten durchgeführt. Bei gleicher Trockendichte zeigte Securso-IUHP etwas höhere Quelldrücke. Es wurden zusätzlich volumenkonstante Quelldruckversuche an heterogenen Proben durchgeführt, die als geschichtete Proben, bestehend aus einer Schicht mit geringer und einer Schicht mit hoher Trockendichte, hergestellt wurden. Diese Proben wurden einmal von der Seite mit geringer Trockendichte, und einmal von der Seite mit hoher Trockendichte hydriert. Es wurde gezeigt, dass infolge der Hydratation von verschiedenen Seiten der heterogenen Probe jeweils ein charakteristischer zeitlicher Verlauf des Quelldrucks einstellt und der finale Quelldruck der heterogenen Probe im Bereich des Quelldrucks der entsprechenden homogenen Probe mit der selben Trockendichte liegt.

Es wurde die Saugspannungs-Wassergehalts-Beziehung für den volumenkonstanten Bewässerungspfad an zwei (Calcigel) bzw. drei (SecUHP) verschiedenen Trockendichten im Bereich zwischen ca. 65 MPa und 10 MPa bestimmt. Die Ergebnisse zeigen, Saugspannungs-Wassergehaltsbeziehung eine Funktion der Trockendichte ist.

Der erste Säulenversuch konnte im Berichtszeitraum noch nicht begonnen werden, da teilweise defekte Sensoren repariert bzw. ersetzt werden mussten. Die materialspezifische und temperaturabhängige Kalibrierung der TDR-Sensoren für Calcigel wurde abgeschlossen.

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

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

### 4. Geplante Weiterarbeiten

**AP2:** Fortführung der Elementversuche bei verschiedenen Randbedingungen (homogen und heterogen). Beginn des ersten Säulenversuches (Calcigel). Beendigung der Versuche zur Bestimmung des volumenkonstanten Bewässerungspfades der Saugspannungs-Wassergehalts-Beziehung (dritte Trockendichte für Calcigel sowie Fortsetzung im Bereich der Saugspannungen  $< 10$  MPa).

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

keine

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> 02 E 12012A	
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Weiterentwicklung von d <sup>3f++</sup> : Hydrogeologische Modellierung im regionalen Maßstab (HYMNE II)			
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> C3.1 Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-)Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung, Punkt 1,2,3 FuE-Feld C3.3 Werkzeuge der Sicherheitsanalysen, Punkt 2			
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2022 bis 30.09.2025		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.10.2022 bis 31.12.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 1.915.790,00 EUR		<b>Projektleiterin:</b> A. Schneider	

### 1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Mit d<sup>3f++</sup> steht ein Werkzeug zur Modellierung der thermohalinen Grundwasserströmung und des Radionuklidtransportes durch poröse und geklüftete Medien zur Verfügung, das seit 1995 im Rahmen der BMWi-geförderten Vorhaben GRUPRO, TRAPRO, E-DuR, A-DuR, H-DuR 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<sup>3f++</sup> auf Modelle im Sedimentgestein und im Kristallin und eine Erhöhung der Prognosesicherheit. Teilziele sind die Kombination einer verbesserten Darstellung explizit bekannter Klüfte und Störungszonen mit stochastischen Methoden sowohl für DFN- als auch EPM, ein effizienter Umgang mit Datenungleichheiten, die effiziente Modellierung langer Zeiträume, die Berücksichtigung der Salinität in der Permafrost-Modellierung, eine effektivere Modellierung des Nuklidtransportes, numerische Verbesserungen sowie Test und Anwendung des Codes. Die Bearbeitung erfolgt in Kooperation mit der Universität Frankfurt.

### 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

Folgende Arbeitspakete werden von der GRS bearbeitet:

- AP 1: Erweiterung der Anwendbarkeit von d<sup>3f++</sup> 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<sup>3f++</sup>
  - 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 Erste Tests mit FracMan wurden durchgeführt.

AP 2.1 Eine Literaturrecherche über den Einfluss der Salinität auf die Zustandsgleichungen unter gefrierenden Bedingungen wurde begonnen.

AP 4.2 Die Arbeiten schließen direkt an die Arbeit im Projekt HYMNE an.

AP 4.3 Mit der Modellierung des Laborexperimentes wurde begonnen.

AP 5 Der Unterauftrag an TECHSIM wurde vergeben.

AP 6 Der Kooperationsvertrag mit der Universität Frankfurt ist in Arbeit.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

AP 1.1 Weiterführung der Tests und Test von dfnWorks, Auswahl und Erarbeitung des Konzeptes für die Anbindung des Kluftgenerators

AP 1.2 Recherche zu existierenden Verfahren und Möglichkeiten der Anbindung von Kontinuumsmodellen (EPM) an d<sup>3f++</sup>, Konzepterstellung

AP 2.1 Die konzeptionellen Arbeiten zur Berücksichtigung der Salinität bei den Phasenübergängen werden abgeschlossen.

AP 4.2 Das Konzept für die äquidimensionale Modellierung der Störungszonen im Äspö SDM wird vervollständigt. Mit der Verwendung der Richardsgleichung für das Modell wird begonnen.

AP 4.3 Die Arbeiten am Laborexperiment werden mit Unterstützung durch TECHSIM weitergeführt.

AP 6 Abschluss des Kooperationsvertrages,

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

keine

<b>Auftragnehmer:</b> Johann Wolfgang Goethe Universität Frankfurt		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 12012B</b>	
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Weiterentwicklung von d3f++: Hydrogeologische Modellierung im regionalen Maßstab (HYMNE II), Teilprojekt B – Kurztitel HYMNE II			
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> „BMW-Forschungsförderung zur nuklearen Sicherheit (2021-2025)“, Themenbereich C „Endlagerung“, insbesondere die Forschungs- und Entwicklungsfelder C3.1 Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-) Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung sowie C3.3 Werkzeuge der Sicherheitsanalysen.			
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.12.2022 bis 30.11.2025		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.12.2022 bis 31.12.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 779.892,00 EUR		<b>Projektleiter:</b> Priv.-Doz. Dr. Arne Nägel	

## 1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Das übergeordnete Ziel des Vorhabens ist die Erweiterung und Verbesserung der Anwendbarkeit von d3f++ 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 d3f++, 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 Datenungewissheiten und die Robustheit der Lösungsverfahren werden weiter verbessert. Durch die Anwendung der kürzlich implementierten sowie der in diesem Vorhaben zu implementierenden Verfahren auf endlagerrelevante Modelle im regionalen Maßstab im Kluft- und Sedimentgestein, mit freier Grundwasseroberfläche und Vorflutern sowie auf Laborexperimente sollen in Teilziel 4 (abgebildet in AP4) die neuen Möglichkeiten des Programms umfangreich getestet, die Prognosesicherheit gestärkt und das Vertrauen in die Modellierung gestärkt werden.

Die Ergebnisse werden zusammen mit den Projektpartnern verwertet. Die große Nutzergemeinde des Simulationssystems UG ist eine ausgezeichnete Plattform zur Verbreitung und Verwertung der Projektergebnisse.

Es erfolgt eine Zusammenarbeit mit der Gesellschaft für Reaktorsicherheit (GRS), Braunschweig, und der Firma TechSim, Kieselbronn, als Unterauftragnehmerin der GRS. Das Verbundprojekt ist ein Folgevorhaben des BMWi-Projekts vom 01.10.2019 – 30.11.2022 (FKZ 02 E 11809B).

## 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

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

*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)* <sup>[L]</sup><sub>[SEP]</sub>

*AP 2: Erweiterung des Anwendungsbereiches von d3f++ (2.1. Permafrost: Berücksichtigung der Salinität bei den Phasenübergängen, <sup>[L]</sup><sub>[SEP]</sub>2.2. Radionuklidtransport: Genauere und effektivere Modellierung)* <sup>[L]</sup><sub>[SEP]</sub>

*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 begonnen.

*AP 2: Erweiterung des Anwendungsbereiches von d3f++ (2.1. Permafrost: Berücksichtigung der Salinität bei den Phasenübergängen, <sup>[L]</sup><sub>[SEP]</sub>2.2. Radionuklidtransport: Genauere und effektivere Modellierung)*

Die Arbeiten wurden entsprechend der im Antrag angegebenen Vorgehensweise begonnen.

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

Die Arbeiten wurden entsprechend der im Antrag angegebenen Vorgehensweise begonnen.

*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 begonnen.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Die Arbeiten werden entsprechend der im Antrag angegebenen Vorgehensweise fortgesetzt.

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

- keine -

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 12032</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Methoden zur experimentellen und numerischen Analyse der geologischen Barriere eines Endlagers in tonreichen Sedimentgesteinsformationen (MAGNUS)		
<b>Zuordnung zum FuE-Förderkonzept des BMWi 2021 - 2025:</b> FuE-Bereich: C „Endlagerforschung“; FuE-Feld: 3.1 „Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCB) Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung“		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2022 bis 30.09.2025	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.10.2022 bis 31.12.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 1.462.465,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Marvin Middelhoff	

## 1. Vorhabenziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

## 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

### AP 1: Probenahme und Probelagerung

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

### AP 2: Methodenentwicklung zur experimentellen Analyse im REV-Maßstab

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

### **AP 3: Methodenentwicklung zur numerischen Analyse in multiplen Maßstäben**

**UAP 3.1** umfasst drei Zielstellungen: Es werden zunächst numerische Modelle mittels des Finite-Elemente-Codes „CODE\_BRIGTH“ im Pre- und Postprozessor „GiD“ generiert. Anschließend werden sie in Verbindung mit dem Mánica-Modell verwendet, um die zuvor durchgeführten Experimente unter Berücksichtigung der Initial- sowie Randbedingungen zu reproduzieren. Während der Reproduktion der Experimente werden die numerischen Eingangsparameter ermittelt und der Eingangsparametersatz für den REV-Maßstab qualifiziert. Im Rahmen des **UAP 3.2** wird der Eingangsparametersatz in Verbindung mit dem Mánica-Modell zur Verbesserung der Simulationen von In situ-Experimenten (z.B. SANDWICH, Mini-Mine-By) verwendet und somit in multiplen Maßstäben qualifiziert.

### **AP 4: Dokumentation**

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

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

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

Des Weiteren wurde eine Methodik zur Ermittlung der Mindestprobenahmeteufe erarbeitet und das MMB-Experiment konzipiert. Die Methodik sowie Konzeption basieren auf empirischen Ansätzen und rechnergestützten Simulationen.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Bearbeitung der einzelnen APs entsprechend der Vorhabenbeschreibung.

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

Die Methodik zur Ermittlung der Mindestprobenahmeteufe sowie das Konzept des MMB-Experiments wurden im Rahmen des „Technical Meeting 40 (TM40)“ des Mont Terri-Konsortiums, welches vom 23.01 bis zum 25.01.2023 in Porrentruy stattfand, in einer Poster-Präsentation kommuniziert.

<b>Auftragnehmer:</b> BGE TECHNOLOGY GmbH, Eschenstraße 55, 31224 Peine	<b>Förderkennzeichen:</b> 02 E 12042A
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> 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	
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> FuE-Feld C3.2: Methodische Grundlagen der Nachweisführung <ul style="list-style-type: none"> <li>• Methodik der Szenarienentwicklung</li> <li>• Methoden zur Bewertung der Robustheit des Sicherheitsnachweises</li> </ul> FuE-Feld C3.3: Werkzeuge der Sicherheitsanalysen <ul style="list-style-type: none"> <li>• Aktualisierung, Weiterentwicklung und weitere Qualifizierung der Methoden und Rechenprogramme für Langzeitsicherheitsanalysen einschließlich der Analyse für Ungewissheiten</li> </ul>	
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.11.2022 bis 31.10.2025	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.11.2022 bis 31.12.2022
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 418.017,25 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Christian Müller

## 1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

## 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

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

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

Allgemein: Am 15.12.2022 fand das erste Projekttreffen per Videokonferenz mit den Projektbeteiligten (BGR, GRS und BGETEC) statt. In einem Übersichtsvortrag wurde zunächst ein Rückblick auf die ersten Phasen des Projektes (CHRISTA-I und –II) gegeben, um anschließend die wesentlichen Projektziele sowie der Projektumfang und –zeitplan der aktuellen Projektphase vorzustellen. Anschließend wurden die Ziele der Arbeitspakete im Detail vorgestellt und es fanden erste Diskussionen zur Ausgestaltung der Ziele statt. Zudem wurde das weitere Vorgehen unter den Projektbeteiligten abgestimmt. Erste Arbeitstreffen zu den einzelnen Arbeitspaketen sollen im Februar und März des Jahres 2023 stattfinden.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Alle Arbeitspakete: Durchführung erster Arbeitstreffen im Q1 2023.

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

-

<b>Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer:</b> GRS gGmbH, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 12042B</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> 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		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm: Forschung zur nuklearen Sicherheit</b> Bereich C3: Sicherheitsnachweis, Feld: 3.2; Feld: 3.3		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.11.2022 bis 31.10.2025	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.11.2022 bis 31.12.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 612.785,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Mayer	

### 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Bei der Durchführung des Vorhabens werden folgende Arbeitspakete bearbeitet:

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

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

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

Im Rahmen des Projektstarts fand am 15.12.2022 ein virtuelles Kick-off-Meeting mit den Projektpartnern zur Planung, Koordinierung und Priorisierung der Arbeiten statt. Dabei wurden der aktuelle Stand und die Ziele in den verschiedenen AP vorgestellt sowie eine Vorgehensweise abgestimmt.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

AP 2: Erarbeitung einer Herangehensweise zur Bewertung einer Kombination bisheriger Einlagerungsoptionen. Betrachtet werden sollen die Kombinationen „mKBS-3/mewG“ (AP2.1), „mKBS-3/üewG“ (AP2.2) und „mKBS-3/üewG/mewG“ (AP2.3). Die Arbeiten sollen in enger Vernetzung mit AP 3 und AP 4 erfolgen.

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

Keine.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Technische Universität Bergakademie Freiberg, Akademiestr. 6, 09599 Freiberg	<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 12072A</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> MgO-Beton C3 als langzeitbeständiges und schnellwirksames Verschlusselement für Schachtverschlüsse zukünftiger HAW-Endlager im Salinar (MgO-C3), Teilprojekt A	
<b>Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Endlagerforschung</b> Bereich C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte; Endlagertechnik und (geo-)technische Barrieren; Feld C2.3	
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.12.2022 bis 30.11.2025	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.12.2022 bis 31.12.2022
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 694.407,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Daniela Freyer

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Im Rahmen des Sicherheitsnachweises zur Integrität eines HAW-Endlagers wird für die rechen-technische Bewertung eines potentiellen Lösungszutritts und der damit potentiell verbundenen Freisetzung von Radionukliden über die verschlossenen Schächte bisher immer nur der Einbauzustand der geotechnischen Barriere mit einer integralen Permeabilität von  $> 10^{-17} \text{ m}^2$  betrachtet. Dieser hohe Wert ergibt sich im Salinar vor allem über die immer vorhandene Auflockerungszone, die sich infolge des Aufkriechens des Salzgebirges nur langsam schließt. Von einer schnellen und auch gleichzeitig langanhaltenden Permeabilitätsverringering, bewirkt durch Schachtverschlusselemente, wie mit dem Einbau einer entsprechenden MgO-Baustoffrezeptur (effektive Abdichtung der ALZ über die schnelle und langanhaltende Expansionsdruckentwicklung des Baustoffs), wird bei der 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; • Verständnisenwicklung 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: Erfassung des IST-Standes am in-situ-Großbohrlochversuch (GBL) in der Grube Teutschenthal (GTS) und Zusammenfassung aller bisheriger Messwerte.
- AP2: Sichtung und Mengenerfassung der Rezepturkomponenten; Planungen/Ausführungen zur Herstellung neuer Druckmesszellen.
- AP3: Als Quarzmehl-Substituent wurde Anhydritmehl in Betracht gezogen. Mögliche und am Markt verfügbare Qualitäten wurden allgemein bewertet und entsprechende Muster bestellt.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1: Fortsetzung des in-situ-Großbohrlochversuch-Monitorings (alle Spannungen, Temperatur, Standortfeuchte); Übernahme des Monitorings über die TUBAF-Messanlage durch das IfG, zudem Beschaffung eines neuen Datenloggers zur Sicherstellung des langfristigen kontinuierlichen Monitorings durch das IfG.  
Für die geplante Lösungsdruckbeaufschlagung wird ein neuer Packer gesetzt.
- AP2: Bereitstellung/beschaffung aller Rezepturkomponenten, Prüfung des Phasenbestandes der MgO-Lieferware von Lehmann&Voss sowie von Styromag, Reaktivitätsbestimmung mittels Zitronensäuretest.  
Bestimmung der Schüttdichte des Sand-/Kieszuschlages von Quickmix sowie von Maxit. Letzterer soll zum Einsatz kommen.  
Laborversuche zur Rezepturherstellung unter Variation des Sand-/Kieszuschlages (Maxit) zur Festlegung von vier Rezepturen für anschließendes Labormonitoring-Programm. Beauftragung der Druckmesszellenherstellung zur anschließenden Aufnahme des Labormessprogramms mit zwei Temperatur-Zeit-Profilen(Fenstern) des Abbindens der vier „C3“-Beton-Rezepturen.
- AP3: Voruntersuchungen der Anhydrit-Muster zur Substitution des Quarzmehls in der bisherigen C3-Beton-Rezeptur mit anschließenden Laborversuchen zur Rezepturherstellung. Analog AP2 wird die Rezeptur (mit einer definierten Menge Sand-/Kieszuschlag im Bereich obiger vier Rezepturen) in je zwei Druckmesszellen neben Zellen zur Phasenbestandsanalyse in das Monitoringprogramm beider TZF's aufgenommen.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

- keine

<b>Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer:</b> Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e.V., Bautzner Landstr. 400, 01328 Dresden		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 12072B</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: MgO-Beton C3 als langzeitbeständiges und schnellwirksames Verschlusselement für Schachtverschlüsse zukünftiger HAW-Endlager im Salinar (NgO-C3), Teilprojekt B		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Forschungsförderung zur nuklearen Sicherheit C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte; Endlagertechnik und (geo-)technische Barrieren mit dem FuE-Feld C2.3 Geotechnische und technische Barrieren		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.12.2022 bis 30.11.2025	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.12.2022 bis 31.12.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 36.856,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> 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 Verständnisentwicklung 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**

administrative und organisatorische Vorbereitung

## **2.2 Vorhaben Bereich D1 – D3**



<b>Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer:</b> Technische Universität Clausthal, Adolph-Roemer-Straße 2a, 38678 Clausthal-Zellerfeld		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11849A</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt A		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2019 bis 30.09.2024	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2022 bis 31.12.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 3.003.244,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Klaus-Jürgen Röhlig	

### 1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

In TRANSENS soll transdisziplinär geforscht werden: Die interessierte Öffentlichkeit und andere außerakademische Akteure werden planvoll in Forschungskontexte, konkret in Transdisziplinäre Arbeitspakete (TAP) eingebunden.

Die Möglichkeiten transdisziplinärer Forschung in der nuklearen Entsorgung werden im Verbund systematisch reflektiert (Transdisziplinaritätsforschung). Spezielle Aktivitäten zielen auf Nachwuchsförderung und Kompetenzerhalt.

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

Das IELF koordiniert gemeinsam mit dem ITAS das Verbundvorhaben sowie die Außenkommunikation.

### 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

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

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

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

Modul SAFE 3: Transdisziplinäre Kommunikation und Auswertung

Modul SAFE 4: Ergebnisdarstellung von Modellrechnungen, Indikatoren, Ungewissheiten

Modul SAFE 5: Analyse des langzeitigen Systemverhaltens von Tiefenlagern

Modul SAFE 7: Lösungsorientierte Berichterstattung und Empfehlungen

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

TH2M-gekoppelten Simulationen; Literaturanalyse; Interaktiver Aufbau einer Gesprächsbasis mit der AGBe; Exemplarische Analyse des offenen / versetzten Tiefen-/Endlagerverhaltens im Monitoringzeitraum anhand von numerischen TH2M-gekoppelten Simulationen; Diskursiver Dialog mit der AGBe zur Identifizierung von Anforderungen an die Ausgestaltung von als vertrauenswürdig angesehenen Monitoringprogrammen; Rückspiegelung an außerwissenschaftliche Akteure / AGBe; Aufbau einer Plattform zur Visualisierung und Illustration von Simulationsergebnissen

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

**ELS (Koordination und Kommunikation):** Im Berichtszeitraum wurden folgende Treffen durchgeführt: Ein Teamleiter:innentreffen in Hannover (12.-13.07.), ein Jour Fixe mit dem Beirat TD (zum TAP SAFE, 23.11.) und insbesondere ein Arbeitstreffen in Kiel (28.-30.09.), das mit den Partner:innen vor Ort vorbereitet und inklusive eines weiteren Teamleiter:innentreffens durchgeführt wurde. Weiterhin wurde der Prozess der Selbstevaluation in TRANSENS begleitet (etwa mit der Organisation von Treffen der Kerngruppe Evaluation oder der Identifikation von zentralen Lehren aus den Berichten der Teams sowie der Redaktion des Evaluations-Syntheseberichts). Die Arbeit beinhaltete auch Aufgabenverteilung und Richtungssetzung zur TRANSENS-Abschlussveranstaltung.

Für TRANSENS wurden der interne und externe Newsletter neu konzipiert und gestaltet: Intern als Informationsverteilung zu TRANSENS-Themen, aber auch zu weiteren Themen rund um die nukleare Entsorgung. Extern, mit einem kontinuierlichen Zuwachs an Abonnenten, wurde die Plattform professionalisiert und neu aufgebaut. Die Bildwelt der Homepage wurde neu erstellt und die Artefakt-Datenbank überarbeitet. Aufgaben wie die Zusammenstellung des Berichts des Koordinators, das Betreiben der TRANSENS-Hotline und das Pflegen der Homepage wurden kontinuierlich fortgeführt.

**ELS (TAP SAFE, EDU):** Im Zweiten Halbjahr war das neu eingestellte Personal gut eingearbeitet. Am 25.07. wurde in Clausthal ein Workshop unter Beteiligung von LUH-IRS, TUC-GEMS und TUC-ELS zur Diskussion verschiedener Sicherheits- und Performance-Indikatoren von Endlagersystemen ausgerichtet. Eine Workshop-Reihe in Kooperation mit der Graduiertenakademie (GA) der TUC und ein Workshop zur Simulationssoftware ReSUS (01.12.) bauten darauf auf. Im Rahmen des Arbeitstreffens in Kiel (28.09. - 30.09.) wurde ein Workshop zur Erprobung der Rich-Picture-Methodik durchgeführt, die bei der späteren GA-Workshop-Reihe zur Anwendung kam. Vom 23.11. bis zum 15.12. wurde diese an vier Terminen mit Promovierenden verschiedener Fachrichtungen durchgeführt. Bearbeitet wurden unterschiedliche Fragestellungen zum Safety Case (z. B. Indikatoren, Ungewissheiten). Der Workshop zur Simulationssoftware ReSUS lieferte Anregungen für die Arbeiten im Modul SAFE-4. Der Meilenstein SAFE M13 wurde erreicht. Die transdisziplinär erarbeiteten Forschungsergebnisse wurden in die wissenschaftliche Fachöffentlichkeit zurückgespiegelt.

Die TRANSENS Sommerschule wurde organisatorisch und konzeptionell unterstützt; es wurden mehrere Vortragende gewonnen und zwei eigene Beiträge geleistet.

**GemS:** Die Entwicklung von multiphysikalischen Simulationen wurde fortgeführt. Eine Weiterentwicklung des Stoffmodells Lux/Wolters/Lerche-T unter Berücksichtigung des anisotropen Materialverhaltens von Tongestein sowie dessen Validierung hat stattgefunden. Die multiphysikalischen Simulationen sollen dem Diskurs mit der AGBe im Hinblick auf die TH2M-Simulation von Zustandsgrößen sowie deren Bedeutung für ein längerfristiges Nahfeld-Monitoring und der räumlichen und sicherheitstechnischen Bewertung eines 2-Sohlen-Endlagers dienen.

TAP SAFE spezifisch wurde die Verschriftlichung der interdisziplinären Zusammenarbeit mit UK-A&O zu menschlichen Faktoren in numerischen Simulationen abgeschlossen und für den Sammelband „Trittsicherheit trotz Ungewissheiten“ aufbereitet. Erste numerische Simulationen am reduzierten Lokalmittelmodell im Tonstein wurden durchgeführt. Die Modellergebnisse und deren Visualisierung zum menschlichen Faktor sowie die THM-Simulationsergebnisse stehen für TD-Formate in Modul 3 zur Verfügung (Meilensteine SAFE M17/M18).

TAP TRUST spezifisch wurde die Auswertung und Verschriftlichung des 2. AGBe-Workshops durchgeführt (TRUST M16). Es wurde ein interaktives Video erstellt, das es den Benutzer:innen ermöglicht, im Endlagerbergwerk in verschiedenen Einlagerungsstrecken Monitoringergebnisse zu begutachten. Der Zwischenbericht zur Visualisierungsplattform wurde erstellt (TRUST M17). Des Weiteren wurde am AGBe-Workshop des TUBS-IGG ein Input zu Modellierungsgewissheiten gehalten und als Beobachter mitgewirkt.

**risicare:** Anne Eckhardt ist im Sprecher:innenteam engagiert. Für die Selbstevaluation des Projektes entstanden Beiträge zum internen Evaluationsbericht und zum Evaluations- Synthesebericht. Als Mitglied der jeweiligen Herausgeber:innenteams wurde sowohl eine Ausgabe der Zeitschrift TATuP zur Zukunft der Entsorgung hochradioaktiver Abfälle als auch die Arbeit am Sammelband „Trittsicherheit trotz Ungewissheiten“ begleitet und Reviews der eingegangenen Beiträge verfasst. Daneben hat risicare die wichtigsten Erkenntnisse zur Optimierung des Safety Case im TAP SAFE zusammengestellt, an Aktivitäten zum digitalen Safety Case und an der Vorbereitung der GA-Workshop-Reihe mitgearbeitet.

#### 4. Geplante Weiterarbeiten

**ELS (Koordination und Kommunikation):** Die geplanten Veranstaltungen (etwa I-TD Klausurtreffen, Projekttreffen Darmstadt 2023) werden organisiert und die Durchführung begleitet. Die Jour Fixes mit dem Beirat TD werden fortgeführt und die Selbstevaluation von TRANSENS wird abgeschlossen.

**ELS (TAP SAFE, EDU):** Im TAP SAFE wird weiterhin verstärkt am Modul 4 gearbeitet. Die GA-Workshop-Reihe wird ausgewertet. Beim Projekttreffen in Darmstadt wird ein TD-Format durchgeführt werden. Ein möglicher gemeinsamer Workshop mit GemS im Mai ist in Planung.

**GemS:** Zukünftig sollen numerische Simulationen im Tongestein mit dem 1- und 2-Sohlen-Lokalmittelmodell durchgeführt werden. Darüber hinaus soll an der Optimierung der Visualisierung von Zustandsgrößen (Indikatoren) weitergearbeitet werden. Hierzu soll in Zusammenarbeit von ELS und GemS an der Ermittlung und Darstellung von Indikatoren und deren Bezug zu Sicherheitskonzepten und Sicherheitsfunktionen gearbeitet werden. Anfang 2023 soll ein dritter AGBe-Workshop zum Thema Monitoring stattfinden.

**risicare:** 2023 sollen zu einzelnen Ergebnissen aus dem zentralen TD-Experiment bei SAFE – in Absprache mit anderen Teams bei SAFE – vertiefende interdisziplinäre Arbeiten durchgeführt werden. Themen für zwei Projekte wurden bereits 2022 identifiziert, die Projektpartner in SAFE angesprochen und Projektskizzen entwickelt.

#### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Othmer, J.A./ Feierabend, J./ Lux, K.-H./ Wolters, R. (2022): Investigation of the impact of an additional monitoring level above the disposal level in a radioactive waste repository in rock salt. In: The Mechanical Behavior of Salt X (Proceedings). Utrecht. ISBN 978-1-032-28220-6; Smeddinck, U./ Mbah, M./ Röhlig, K.-J./ Brendler, V. (2022): Das "lernende" Standortauswahlverfahren für ein Endlager radioaktiver Abfälle. Interdisziplinäre Beiträge, Berliner Wissenschafts-Verlag, Berlin 2022, ISBN: 978-3-8305-5182-9, doi:10.35998/9783830555124; Smeddinck, U./ Eckhardt, A./ Kuppler, S. (2022): Toward a repository for high-level radioactive waste: Perspectives and approaches, in: Zeitschrift für Technikfolgenabschätzung in Theorie und Praxis, Vol. 31, Nr. 3 2022, S. 11-17; Eckhardt, A./ Röhlig, K.-J. (2022), Vortrag: Safety facing uncertainty - decisions about and under uncertainty. Extraordinary Meeting Of The Integration Group For The Safety Case (IGSC), OECD Nuclear Energy Agency, Bern, 19.05.2022; Eckhardt, A./ Röhlig, K.-J. (2022), Vortrag: Safety facing uncertainty. Steps towards a holistic and more comprehensive assessment of uncertainties in the Safety Case. 3rd DAEF Symposium: Key Topics on Deep Geological Disposal – Challenges of a Site Selection Process: Society – Procedures – Safety, Deutsche Arbeitsgemeinschaft Endlagerforschung, Köln, 06.07.2022; Othmer, J.A./ Feierabend, J./ Lux, K.-H./ Wolters, R. (2022), Vortrag: Investigation of the impact of an additional monitoring level above the disposal level in a radioactive waste repository in rock salt. 10th Conference on the Mechanical Behavior of Salt (SaltMechX) 07.07.2022; Röhlig, K.-J. (2022), Vortrag: Input from outside the Safety Case community: Improving Safety Case content and communication using electronic tools. NEA IDKM/EGSSC Workshop on Digital Safety Case Methods and Development. Berlin, 25.-26.10.2022, Röhlig, K.-J./ Ebeling, M./ Eckhardt, A./ Hocke, P./ Krütli, P. (2022), Vortrag: Transdisciplinary research on nuclear waste management – can it work? A case study on repository safety. 3rd DAEF Symposium: Key Topics on Deep Geological Disposal – Challenges of a Site Selection Process: Society – Procedures – Safety. Köln, 05.-07.07.2022

<b>Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer:</b> Christian-Albrechts-Universität zu Kiel, Philosophisches Seminar		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11849B</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt B		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle</b> Bereich 5: Wissensmanagement und sozio-technische Fragestellungen, Feld 5.2		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2019 bis 30.09.2024	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2022 bis 31.12.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 1.375.945,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Konrad Ott	

## 1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

In TRANSENS soll transdisziplinär geforscht werden: Die interessierte Öffentlichkeit und andere außerakademische Akteure werden planvoll in Forschungskontexte, konkret in Transdisziplinäre Arbeitspakete (TAP) eingebunden.

Die Möglichkeiten transdisziplinärer Forschung in der nuklearen Entsorgung werden im Verbund systematisch reflektiert (Transdisziplinaritätsforschung). Spezielle Aktivitäten zielen auf Nachwuchsförderung und Kompetenzerhalt.

Die Arbeitsgruppe an der CAU ist Projektpartner im TAP DIPRO.

Dialog und Diskurs sind Schlüssel zur Verständigung. Wie muss der langwierige Prozess gestaltet werden, um dafür gute Bedingungen auf dem Entsorgungspfad zu schaffen? Das ist Gegenstand der transdisziplinären Forschung im TAP DIPRO.

Am Philosophischen Seminar und am Institut für Informatik werden in interdisziplinärer Kooperation (i) Narrative des Entsorgungsdiskurses analysiert, (ii) eine Theorie von "wicked communication" entwickelt, (iii) gesellschaftliche Steuerungsmedien bewertet, (iv) Nachvollziehbarkeit und Transparenz des Entsorgungsprozesses wissenschaftstheoretisch untersucht und über Visualisierungen für den transdisziplinären Forschungsmodus aufbereitet, unterstützend wird hierzu (v) eine Multimediawerkstatt aufgebaut.

## 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

Das Arbeitsprogramm in DIPRO zeichnet sich durch eine disziplinäre Aufbereitung von Sachverhalten, die interdisziplinäre Verständigung darüber und im Kern der Forschungsarbeit durch Workshops aus, bei denen verschiedene transdisziplinäre Formate entsprechend der Themensetzung zur Anwendung kommen werden. Im ersten Projektjahr soll zudem eine eigens für DIPRO gebildete Begleitgruppe aus wenigen Laien eingesetzt werden, die die Gestaltung und die Inhalte der Workshops über die Projektlaufzeit hin reflektiert. Die zentralen Forschungsfragen, die DIPRO an die Begleitgruppe und die Workshops stellt, sind:

1. Welche normativen Voraussetzungen, praktischen Anforderungen und gesellschaftlichen Erwartungen gilt es, für ein gerechtes und resilientes Verfahren und den jeweiligen Entsorgungspfad zu berücksichtigen? 2. Welche gesellschaftlichen Erwartungen und Ansprüche an eine zielführende Endlager-Governance und Öffentlichkeitsbeteiligung lassen sich identifizieren und wie können diese in politische Maßnahmen einfließen?

3. Wie ist das Standortauswahlverfahren unter Bedingungen von „wicked problems“ und „wicked communication“ im Sinne von „good governance“ auszugestalten?

Neben anwendungsorientierter Grundlagenforschung (desk-research, Experimente) bestehen die wesentlichen Arbeitspunkte des Kieler Teilprojektes in der Entwicklung, Durchführung und Evaluation transdisziplinärer Formate (Workshops, Multimediawerkstatt, Informationsdesigns). Inhaltliche Schwerpunkte liegen auf Verfahrensgerechtigkeit, Kommunikation und Standortverantwortung.

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- Weiterentwicklung Kommunikationsstrukturen innerhalb DIPROs
- Fortsetzung Aufarbeitung des Forschungsstandes inter- und transdisziplinärer Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle.
- Kontinuierliche Arbeit mit der DIPRO-Begleitgruppe (DBG): monatliche Teeküche; inhaltliche Workshops zur a) Reflexion der Ergebnisse der DBG-Selbstevaluierung (07.07.2022 online) und b) Rückblick auf den Arbeitsplan 2022 (12.2022 online).
- Besuch des Infozentrums am AKW Brokdorf zum Zweck der Planung des Workshops E-1 (13.07.2022)
- Teilnahme am TRANSENS-Bearbeiter:innen Treffen in Braunschweig (7. – 9.9.2022)
- Durchführung des TRANSENS-Arbeitstreffens in Kiel (28.-30.09.2022)
- Mitarbeit bei der Auswertung des Workshops D und Präsentation der Ergebnisse im Projekt-treffen in Kiel (29.09.2022)
- Teilnahme am Autoren-Workshop des TAP-übergreifenden Sammelbands „Ungewissheiten“ in Kassel (07.10.2022). Überarbeitung der 2 eingereichten Beiträge.
- Durchführung des Workshops E-1 (14.-15.10.2022)
- Teilnahme + Beitrag von einem Poster beim Workshop B in Berlin (22.10.2022)
- Teilnahme am Öffentlichkeitsbeteiligungs-Workshop der FFU in Berlin (25.11.2022)
- Vorbereitung des Workshops E-2 mit TAP HAFF (monatlich)
- Überarbeitung von 2 wissenschaftlichen Beiträgen zum TATuP thematischen Heft 03/2022.
- Teilnahme an regelmäßigen TD-Treffen mit anderen TAPs.
- Vorstellung von Projektergebnissen:
  - Paula Bräuer: Eine sprachbasierte KI für politische Beteiligung. *Mensch und Computer 2022* (4.-6.9.2022)

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Durchführung von Workshop E-2 in Lubmin (31.03.-01.04.2023)
- Vorbereitung des Workshops E-3 (Termin und Ort noch ausstehend)
- Vortrag (Christian Loos) in der TRANSENS-Ringvorlesung (13.01.2023)

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

- Berg, M. und Hassel, T. (2022): Challenges in communicating the future of high-level radioactive waste disposal: What future are we talking about? TATuP - Zeitschrift für Technikfolgenabschätzung in Theorie und Praxis (2022) 31/3: 18-23.
- Bräuer, P., & Mazarakis, A. (2022): A Speech-Based AI for Political Participation: Eine sprachbasierte KI für politische Beteiligung. *Mensch und Computer 2022 (MuC '22)*, September 4--7, 2022, Darmstadt, Germany. <https://doi.org/10.1145/3543758.3549889>
- Sierra, R. und Ott, K. (2022): Citizen participation in the long-term process of high-level radioactive waste disposal: Future tasks and adequate forms of participation. TATuP - Zeitschrift für Technikfolgenabschätzung in Theorie und Praxis (2022) 31/3: 44–50.

<b>Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer:</b> Freie Universität Berlin, Forschungszentrum für Umweltpolitik		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11849C</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundvorhaben: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland – TRANSENS, Teilprojekt C		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle – Förderkonzept des BMWi (2015-2018), FuE-Bereich 5		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2019 bis 31.09.2024	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2022 bis 31.12.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 991.894,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> 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

- Organisation, Durchführung und Nachbereitung von 3 Workshops in Berlin
- 2 Vorträge bei Fachtagungen und Workshops
- 3 Veröffentlichungen von Beiträgen (peer-review), 2 Zeitungsartikel (Gastbeiträge)
- 3 Einreichungen von Beiträgen in Journals, Fertigstellung eines Beitrags für einen Sammelband

#### DIPRO:

- Zusammenarbeit mit DIPRO-Begleitgruppe (DBG):
  - Konsultationen / TelKos zum Konzept Workshop B (Inhaltliche Schwerpunkte, Programm)

- Gemeinsame Reflexion zum Workshop B am 15.11.2022; Start der Kommentierung der Auswertung Workshop B durch DBG
- Evaluation der Zusammenarbeit in DIPRO (mit allen TRANSENS-DIPRO-Partnern)
- 1x monatlich stattfindende informelle Treffen zum Austausch („Teeküche“)
- Vorbereitung, Durchführung und Nachbereitung von Workshop B „(Nicht) Mein Endlager“ am 22. Oktober im Museum für Naturkunde Berlin (30 Teilnehmer\*innen / vier aus DBG) (in Koop. mit der TUB)
- Vorbereitung, Durchführung und Nachbereitung des Workshops „Zum Verhältnis von Politik und Wissenschaft in der Standortsuche für ein Endlager“ am 3. und 4. Nov. (30 Teilnehmer\*innen)
- Vorbereitung, Durchführung und Nachbereitung des Workshops „Öffentlichkeitsbeteiligung bei der Standortsuche für ein Endlager für hochradioaktive Abfälle“ am 25. November (40 Teilnehmer\*innen / drei aus DBG (in Koop. mit der TUB))
- Fertigstellung des Beitrags „Nuclear waste governance in Germany“ für Springer VS
- Arbeit an peer-reviewed Veröffentlichungen: 1. Konzeptpapier zum „weichen Endlagerstaat“, 2. Kompensation, 3. TD in der Endlagerforschung, 4. „Inklusion / Exklusion in der Öffentlichkeitsbeteiligung“; 5. Vorbereitung eines Beitrags „Auswertung von Workshop B im Museum“/ Weiterarbeit am Beitrag für den Sammelband „Ungewissheiten“ zu wicked financing
- Überarbeitung und Veröffentlichung von zwei TATuP-Beiträgen zu den Promotionsvorhaben: neue Perspektiven auf intergenerationale Gerechtigkeit und Commoning in der Standortsuche
- Mitkonzeption und -organisation der Sommerschule von TRANSENS (19.-28.08.2022) in Bad Honnef (Koop. mit diversen TRANSENS-Partnern, Federführung LUH)
- Organisation von einem Bearbeiter\*innentreffen in Präsenz und zwei virtuellen Treffen BegleitTeam.TD:

- Bearbeitung eines Beitrages zum Thema „Mehrwert transdisziplinärer Forschung“

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

- Intensivierung der Arbeit an den Dissertationen von Themann / Schwarz
- Weiterarbeit an Manuskripten – siehe oben „Arbeit an peer-reviewed Veröffentlichungen“
- Auswertung der Workshops

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

##### **VORTRÄGE:**

- Denk, A. (07.07.2022) Die Suche nach einem Endlager für hochradioaktive Abfälle aus politikwissenschaftlicher Sicht; Leibniz-Gesellschaft, Akademie der Raumentwicklung Würzburg
- Denk, A. (09.09.2022) Exklusionsmechanismen in der transdisziplin. Forschung; TU Braunschweig

##### **VERÖFFENTLICHUNGEN:**

- Schwarz, L. (2022): Is It All about a Science-Informed Decision? A Quantitative Approach to Three Dimensions of Justice and Their Relation in the Nuclear Waste Repository Siting Process in Germany. *Societies*, 12(6), 176, <https://doi.org/10.3390/soc12060179>
- Schwarz, L. (2022): Intergenerational justice starts now: Recognizing future generations in nuclear waste management. *TATuP* 31/3: 37-43, <https://doi.org/10.14512/tatup.31.3.37>
- Themann, D. (2022): Commoning in der Standortsuche für ein Endlager? Neue Wege kollektiven Handelns. *TATuP* 31/3: 51-57, <https://doi.org/10.14512/tatup.31.3.51>
- Brunnengräber, A. (2022): Die wahren Kosten der Atomenergie, *Berliner Zeitung* 30.09.2022
- Brunnengräber, A.; Denk, A.; Schwarz, L. (2022): Abschalten – jetzt erst recht!, Gastbeitrag auf Spiegel online (Politik), 07.08.2022,

<b>Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer:</b> Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Hermann-von-Helmholtz-Platz 1, 76344 Eggenstein-Leopoldshafen		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11849D</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt D		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 5: Wissensmanagement und sozio-technische Fragestellungen, Feld 5.2		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2019 bis 30.09.2024	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2022 bis 31.12.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 550.967,50 EUR	<b>Projektleiter:</b> 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 Entsorgungspfades analysiert werden. Im weiteren Verlauf des Verbundvorhabens soll gemeinsam mit Partnern des TAP HAFF Haltepunkte definiert werden, an denen der jeweilige Sicherheitsstatus eines Entsorgungspfades überprüft und ein Dialog mit der Bevölkerung angestrebt wird.

Zusammenarbeit im Forschungsverbund TRANSENS: Das Arbeitspaket 2 „Technische und verfahrenstechnische Komponenten von Entsorgungspfaden und deren Nebenfolgen“ wird durch einen Mitarbeiter des KIT-INE geleitet.

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im zweiten Halbjahr 2022 arbeiteten F. Becker und V. Metz im Rahmen des von Dirk Scheer (KIT-ITAS) initiierten Teilprojekts „Zukunftspfade Endlager“ zur Pfadidentifikation, Folgenanalyse und einer vergleichenden Pfadheuristik. In diesem Kontext wurde gemeinsam mit D. Scheer und anderen Mitverfassern mit dem Manuskript „Trittsicherheit auf Zukunftspfaden? Strategien der Ungewissheitsbewältigung bei der Entsorgung hochradioaktiver Abfälle“ zu dem TRANSENS Sammelband «Ungewissheiten» beitragen, der in einer interdisziplinären Zeitschrift für Technikfolgenabschätzung veröffentlicht werden soll. F. Becker gehört zum Herausgeberteam des Sammelbands und war am Treffen der Autorinnen und Autoren des Sammelbands am 7. Oktober in Kassel und am Review Prozess der eingereichten Manuskripte beteiligt. Neben den oben genannten Manuskript von D. Scheer et al. hat F. Becker selbst noch mit den Manuskripten „Kommunikation von quantitativen Ergebnissen“ und „Ungewissheiten und Narrative – eine schwierige Beziehung?“ zum Sammelband beigetragen. Am TRANSENS-Arbeits-treffen in Kiel, 28.-30. September hatte V. Metz teilgenommen, auf dem die Ergebnisse des ersten Manuskripts im Vortrag von D. Scheer „Zukunftspfade Endlager: Entwicklung und Analyse einer Pfadheuristik aus vergleichender Perspektive“ diskutiert wurden.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Zusammen mit A. Eckhardt, D. Scheer u.a. wird F. Becker die Endversionen der Manuskripte zum TRANSENS-Sammelband „Ungewissheiten“ redigieren, der im ersten Halbjahr 2023 in der Zeitschrift „TATuP - Zeitschrift für Technikfolgenabschätzung in Theorie und Praxis“ eingereicht werden soll. Als nächster Schritt in der TAP-übergreifenden Zusammenarbeit von F. Becker und V. Metz mit der Arbeitsgruppe der Technischen Universität Berlin / Wirtschafts- und Infrastrukturpolitik (TUB-WIP) und der Arbeitsgruppe des KIT-ITAS zu „techno-ökonomischen Aspekten“ der Entsorgung hochradioaktiver Abfälle wird ein zweitägiges Treffen der drei Gruppen im KIT-INE und KIT-ITAS im Februar 2023 vorbereitet. Mit weiteren Mitarbeiterinnen und Mitarbeitern des TAP-HAFF werden die Pfadidentifikation und Folgenanalysen weiterentwickelt. Für die Bearbeitung von Entsorgungspfaden sind zwei oder mehr Schreibprojekte vorgesehen. Als erstes Manuskript soll Anfang 2023 gemeinsam mit T. Hassel (Leibniz Universität Hannover / Institut für Werkstoffkunde) der Teilpfad zu einer theoretischen „direkten Einlagerung von hochradioaktiven Abfällen in Transport- und Lagerbehältern“ beschrieben werden.

Die Auswahl, Einstellung und Einarbeitung einer geeigneten Kandidatin oder eines geeigneten Kandidaten für die Promotionsstelle wurde aufgrund der Einschränkungen durch COVID-19 bedingt auf das erste Halbjahr 2023 verschoben.

Neben einigen virtuellen Treffen im Arbeitspaket TAP HAFF ist eine Teilnahme am HAFF-Klausurtag mit Präsenzteilnahme in Karlsruhe am 30. Januar und am TRANSENS-Projekt-treffen in Darmstadt vom 1. bis 3. März geplant.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine im zweiten Halbjahr 2022

<b>Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer:</b> Karlsruher Institut für Technologie, Institut für Technikfolgenabschätzung und Systemanalyse		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11849E</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundvorhaben: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt E (Institut für Technikfolgenabschätzung und Systemanalyse)		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle – Förderkonzept des BMWi (2015-2018)		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2019 bis 30.09.2024	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2022 bis 31.12.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 2.720.831,11 EUR	<b>Projektleiter:</b> 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 Datenanalyse für das ITAS-AP „Verwaltungshandeln in einem bundesdeutschen reversiblen Verfahren für die aktuelle Suche nach einem Endlagerstandort für hochradioaktive Abfälle“ wurde unter Einsatz von MAXQDA aufgenommen und weit vorangetrieben. Die konzeptionellen Grundlagen zum zweiten ITAS-Themenstrang „Denken in Alternativen“ werden aktuell verschriftet und Zwischenergebnisse wurden bei einer Tagung internationaler Umweltpolitologen vorgetragen. Aus dem interdisziplinären ITAS-Teilprojekt „Zukunftspfade Endlager – Entwicklung und Analyse einer Pfadheuristik unter den Paradigmen Handlungsfähigkeit und Flexibilität in einem reversiblen Verfahren“ entstand ein Buchbeitrag für einen Sammelband in einem Fachverlag, der sich ebenso wie ein Beitrag aus dem ITAS-AP „Verwaltungshandeln“ nach Review in der finalen Ausarbeitung befindet. Im Rahmen der HAFF-Leitung wurden inhaltliche Arbeitsteilungen zusammengefasst und erste HAFF-Zwischenergebnisse festgehalten. Wichtig sind dabei die vertieften HAFF-Kooperationen mit

dem KIT-INE, dem TUB-iBMB, dem LUH-IW und dem Öko-Institut sowie dem TAP-SAFE. In der Moderation unterstützte HAFF den DIPRO-Workshop zur Öffentlichkeitsbeteiligung an der TU Berlin.

TAP DIPRO: Im 2. Halbjahr verließ die juristische Mitarbeiterin für eine attraktive Leitungsstelle das Team und konnte glücklicherweise zeitlich überlappend mit einer neuen geeigneten Kraft ersetzt werden. Nach wie vor steht die Arbeit an der 2. Auflage des Kommentars zum StandAG, Smeddinck (Hg.), im Vordergrund. Erste fertige Texte liegen vor. Federführend werden zum einen ein Stakeholder-Workshop mit der Deutschen Arbeitsgemeinschaft für Endlagerforschung (DAEF) zum lernenden Verfahren und zum anderen ein interdisziplinäres Kolloquium zur Standortvereinbarung nach Standortauswahlgesetz vorbereitet. Zum letztgenannten Thema hat die neue Mitarbeiterin eine Dissertation begonnen.

Beim Arbeitstreffen in Kiel im Oktober 2022 war die ITAS-Kollegen aus HAFF und DIRPO mit insgesamt drei Fachvorträgen und einem transdisziplinären Workshop-Bericht vertreten. Ein Sammelband zu „Long-term Governance“ und einer zum „lernenden Verfahren“ im deutschen Standortauswahlverfahren für hoch radioaktive Abfälle sind in TAP-übergreifender Zusammenarbeit erschienen.

TAP SAFE: Die Durchführung der neuen transdisziplinären Zusammenarbeit mit der Graduierten-Akademie wird zusammen mit dem Kernteam der TU Clausthal und risicare durch das ITAS unterstützt.

TAP EDU: Fortführung des ITAS-Textseminars zu einschlägiger Forschungsliteratur, die sowohl transdisziplinäre Themen aufgreifen als auch interdisziplinäre neue Wissensbestände für HAFF und DIPRO erschließen.

#### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Konkretisierung der transdisziplinären Elemente, für die ITAS in HAFF verantwortlich ist. Co-Vorbereitung des DIPRO-Workshops F (zusammen mit IW Hannover);
- DIPRO befindet sich in der Auswertung der inzwischen durchgeführten Workshops. DIPRO-Klausur zur Auswertung der bisherigen Ergebnisse am 16.2.2023.
- Vorbereitung eines interdisziplinären DIPRO-Workshops zur Standortvereinbarung.
- Umsetzung der Vorhaben aus dem HAFF-Arbeitsbericht „Verzahnungen, Haltepunkte und Wissenskonflikte“ (interdisziplinäre Ausarbeitung der HAFF-„Zukunftspfad(e)“.
- Abschluss und Bericht des ITAS-HAFF-AP „Verwaltungshandeln“.
- Fortführen und Planung neuer Weiterbildungsaktivitäten zum Thema „TA und Governance im selbstlernenden Verfahren“ sowie dialogische Beratungen zu den Themen „lernendes Verfahren“ und „Junge Generation“ in der nuklearen Entsorgung.
- Kommentierung des StandAG für die Neuauflage des Kommentars, Smeddinck (Hg.).

#### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Grunwald, Armin (2022): Die Endlagerkommission des Deutschen Bundestages: Prozess- und Endlagermonitoring, in Hocke, Peter; Kuppler, Sophie; Smeddinck, Ulrich; Hassel, Thomas (Hg.): Technical Monitoring and Long-Term Governance of Nuclear Waste, Nomos, S. 81-94

Hocke, Peter/ Kuppler, Sophie/ Smeddinck, Ulrich/ Hassel, Thomas (Hg.) (2022): Technical monitoring and long-term governance: an introduction, in Hocke, Kuppler, Smeddinck, Hassel (2022): Technical Monitoring and Long-term Governance of Nuclear Waste. Baden-Baden: Nomos, S. 7-20; Hocke, Peter/ Kuppler, Sophie/ Smeddinck, Ulrich/ Hassel, Thomas (2022): Technical Monitoring and Long-term Governance of Nuclear Waste. Baden-Baden: Nomos/edition sigma

Mbah, Melanie / Hocke, Peter (2022): Anforderungen an Transparenz und Partizipation in einem lernenden Verfahren zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle, In: Das „lernende“ Standortauswahlverfahren für ein Endlager radioaktiver Abfälle. Interdisziplinäre Beiträge, Hg. Ulrich Smeddinck, Klaus-Jürgen Röhlig, Melanie Mbah, Vinzenz Brendler, Berlin: Berliner Wissenschafts-Verlag 2022, S. 43-69; Smeddinck, Ulrich (2022): Lernen ohne Ende? Das lernende Standortauswahl-verfahren nach § 1 Abs. 2 S. 1 StandAG (als Ausgangspunkt für Long-term Governance), in: Ulrich Smeddinck, Klaus-Jürgen Röhlig, Melanie Mbah, Brendler, Vinzenz (Hg.), Das „lernende“ Standortauswahlverfahren für ein Endlager radioaktiver Abfälle, Berlin 2022, S.85-105; Smeddinck, Ulrich/ Eckhardt, Anne/ Kuppler, Sophie (2022): Toward a repository for high-level radioactive waste: Perspectives and approaches. Zeitschrift für Technikfolgenabschätzung in Theorie und Praxis, 31 (3), 11-17; Smeddinck, Ulrich/ Röhlig, Klaus-Jürgen/ Mbah, Melanie/ Brendler, Vinzenz (Hg.) (2022): Das "lernende" Standortauswahlverfahren für ein Endlager radioaktiver Abfälle. Interdisziplinäre Beiträge. Berlin: Berliner Wissenschafts-Verlag; Smeddinck, Ulrich/ Semper, Franziska (2022): Long-term Governance zur Begleitung eines Endlagers aus rechtswissenschaftlicher Sicht, in Peter Hocke/Sophie Kuppler/Ulrich Smeddinck, Thomas Hassel (Hg.), Technical Monitoring and Long-Term Governance of Nuclear Waste, S.111-126

<b>Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer:</b> Leibniz Universität Hannover, Welfengarten 1, 30167 Hannover		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11849F</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt F		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Nukleare Entsorgungsforschung BMWi „Schaffung der wissenschaftlich-technischen Grundlagen zur Realisierung eines Endlagers für insbesondere Wärme entwickelnde radioaktive Abfälle“ sowie „Aufbau, Weiterentwicklung und Erhalt der wissenschaftlich-technischen Kompetenz und zur Nachwuchsförderung“; Bereich 5: Wissensmanagement und sozio-technische Fragestellungen, Feld 5.2		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2019 bis 30.09.2024		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2022 bis 31.12.2022
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 3.473.288,00 EUR		<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Walther

## 1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

In TRANSENS soll transdisziplinär geforscht werden: Die interessierte Öffentlichkeit und andere außerakademische Akteure werden planvoll in Forschungskontexte, konkret in Transdisziplinäre Arbeitspakete (TAP) eingebunden. Die Möglichkeiten transdisziplinärer Forschung in der nuklearen Entsorgung werden im Verbund systematisch reflektiert (Transdisziplinaritätsforschung). Spezielle Aktivitäten zielen auf Nachwuchsförderung und Kompetenzerhalt. LUH IRS/IW und ETH Zürich tragen zu allen vier TAP bei: Flexibilität statt linearer Ablauf des Verfahrens: schrittweises Vorgehen, Haltepunkte im Verfahrensablauf, die Option von begründeten Rückschritten und die Reaktion auf neue Forschungsergebnisse sind die Themen der transdisziplinären Forschung im TAP HAFF. Dialog und Diskurs sind Schlüssel zur Verständigung. Wie muss der langwierige Prozess gestaltet werden, um dafür gute Bedingungen auf dem Entsorgungspfad zu schaffen? Das ist Gegenstand der transdisziplinären Forschung im TAP DIPRO. In einem Verfahren, das die Rückholung eingelagerter Abfälle im Falle einer ungünstigen Entwicklung des Lagers vorsieht, muss man sich frühzeitig Gedanken machen über Monitoring-Strategien, Entscheidungswege, Entscheidungsträger und Verantwortlichkeiten. Dies ist Gegenstand des TAP TRUST. Im TAP SAFE wird transdisziplinär untersucht, ob und inwieweit Sichtweisen von Nicht-Spezialisten nahelegen, das Konzept des Safety Case anzupassen oder weiterzuentwickeln, um so die Diskurs- und Beratungsfähigkeit zu verbessern.

## 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

### IRS:

TAP TRUST: Modul 1: Übergreifender Rahmen des TAP TRUST und Leitung der AGBe  
Modul 2: Transdisziplinäre Erarbeitung eines Programms zur Umweltüberwachung  
TAP SAFE: Modul 6: Die Rolle der radioökologischen Modellierung im Safety Case  
EDU: Aus- und Weiterbildung

### IW:

TAP HAFF: Modul 1: Pfadabhängigkeit als Risiko und Herausforderung  
Modul 2: Raumwirkungen und Governance  
Modul 3: Konzeptionelle Grundlagen und Basisinformationen  
TAP DIPRO: Workshop D: Darstellung technischer Randbedingungen  
Workshop F: Transdisciplinarity meets reality – Lessons learned

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

IRS: TAP TRUST (Modul 1): Die zweite Online-Befragung zum Thema Vertrauen wurde erfolgreich über *Bilendi* umgesetzt. Daran anknüpfend wurden psychologische Experimente zur Darstellung von Ungewissheiten durchgeführt. Die Ergebnisse fließen in Berichte und einen interdisziplinären Sammelband ein. Zudem wurden weitere Workshops mit der Arbeitsgruppe Bevölkerung (AGBe) zu verschiedenen Themen mitorganisiert, analysiert und ausgewertet sowie mehrere Vorträge auf Fachtagungen gehalten.

- TAP TRUST (Modul 2): Im Rahmen von Schulbesuchen wurden Schüler in das Thema Radioaktivität eingeführt und Kooperationen mit Lehrkräften geschlossen, um diese langfristig in der Nutzung der Messstelle auszubilden. Im Zuge der transdisziplinären Zusammenarbeit wurden weitere Bedarfe an Messergebnissen über die Gamma-Spektrometrie hinaus identifiziert. So wurden auf Anfrage – neben ODL-Messungen im privaten und öffentlichen Raum – in Kooperation mit einer BI auch Proben von Baumscheiben für die C-14 Messung und Oberflächenwasser zur Tritium-Bestimmung genommen, die im Rahmen einer BA-Arbeit analysiert werden.

- TAP SAFE (Modul 6): Das radioökologische Modell der Berechnungsgrundlage Endlager wurde hinsichtlich seiner Expositionspfade und der damit zusammenhängenden Parameter analysiert. Dabei wurden vor allem Parametersensitivitäten und -unsicherheiten untersucht. Zudem wurde das auf der Berechnungsgrundlage basierende Computermodell zur Dosisabschätzung erweitert. Außerdem wurden vorbereitende Arbeiten für Transportsimulationen im Boden mittels Smart-KD durchgeführt. Dazu gehören u.a. die Einarbeitung in Phreeqc sowie Literatur- und Datenrecherchen zur Bodenkunde.

- EDU: Die Ringvorlesung wurde einmal wöchentlich von abwechselnden Referenten aus dem Projekt gehalten. Der Vorlesungsplan für die Sommerschule wurde in Zusammenarbeit mit den Partnern des Projektes erarbeitet.

- IW: TAP HAFF:

- IW: TAP DIPRO:

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- IRS: TAP TRUST (Modul 1): Derzeit wird an der Veröffentlichung zweier wissenschaftlicher Paper zum Thema Werte, Vertrauen und Akzeptanz sowie zu den Ergebnissen der zweiten Online-Befragung gearbeitet.

- TAP TRUST (Modul 2): In Zusammenarbeit mit Bürgern vor Ort wird für das kommende Frühjahr eine gemeinsame Veranstaltung geplant, in der die bisherigen Ergebnisse der Bürgermessstelle öffentlich diskutiert und in den Zusammenhang des in der Region Asse geführten Diskurses gestellt werden. Des Weiteren sind weitere Besuche an Schulen der Region Asse geplant.

- TAP SAFE (Modul 6): Zu den untersuchten Parametersensitivitäten und -unsicherheiten soll ein TRANSENS-Bericht veröffentlicht werden. Zudem wird ein Workshop mit der AGBe geplant.

- (EDU): Für das kommende Semester wird erneut eine Ringvorlesung organisiert.

- IW: TAP HAFF:

- TAP DIPRO:

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

<b>Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer:</b> Öko-Institut e. V., Rheinstraße 95, 64295 Darmstadt		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11849G</b>
<b>Vorhabenbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt G		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> FuE Bereich 2: Wissenschaftliche Grundlagen der Standortauswahl (Feld 2.3) FuE Bereich 3. Endlagerkonzepte und Endlagertechnik (Felder 3.1 und 3.4) FuE Bereich 4 Sicherheitsnachweis (Felder 4.2 und 4.4)		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2019 bis 30.09.2024	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2022 bis 31.12.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 505.379,00 EUR	<b>Projektleiterin:</b> Julia Neles	

## 1. Vorhabenziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

Das TAP HAFF fokussiert auf die Flexibilität des Verfahrens, die statt eines linearen Ablaufs, ein schrittweises Vorgehen ermöglicht, das Haltepunkte im Ablauf und die Option von Rücksprüngen sowie die Reaktion auf neue Forschungsergebnisse vorsieht. Das TAP SAFE fokussiert u.a. auf Fragen der Kommunikation und des Umgangs mit Ungewissheiten im Rahmen des Safety Case (SC). Dabei wird transdisziplinär untersucht, ob und inwieweit Sichtweisen von Nicht-Spezialisten nahelegen, das Konzept des SC anzupassen oder weiterzuentwickeln.

## 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

### TAP HAFF: Handlungsfähigkeit und Flexibilität in einem reversiblen Verfahren

Das TAP gliedert sich in drei Module und beinhaltet folgende Arbeitsschritte:

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

### TAP SAFE: Stakeholder-Perspektiven und Transdisziplinarität

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

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Vom 28.09. bis 30.09.22 fand ein TRANSENS Gesamttreffen in Kiel statt. Für übergeordnete und organisatorische Aufgabenstellungen (z. B. zur Selbstevaluation) haben wir an verschiedenen Treffen teilgenommen. In beiden TAPs wurden die regelmäßigen Arbeitstreffen überwiegend im digitalen Format fortgesetzt.

TAP HAFF: Modul 1: Aus den Arbeiten zu den Zukunftspfaden wurden vier Teilprojekte zur vertieften Bearbeitung abgeleitet. Das Team vom Öko-Institut befasst sich mit der Neugenehmigung von Zwischenlagern nach 40 Jahren Betriebszeit.

Modul 2: Im Berichtszeitraum wurden fünf zusätzliche vertiefende Interviews in den ausgewählten Regionen im Landkreis Heilbronn, im Landkreis Görlitz und im Kreis Recklinghausen durchgeführt und ausgewertet. Zudem wurde der transdisziplinäre Workshop zur „Wahrnehmung von Oberflächenanlagen eines Endlagerstandortes“ vorbereitet und am 26.11. an der Universität Kassel durchgeführt. Die Federführung hatte hierbei wiederum das Öko-Institut in Kooperation mit dem iBMB der TU Braunschweig und A&O der Universität Kassel. In zwei Zeitslots von jeweils 3 Stunden (vormittags und nachmittags) nahmen insgesamt 39 Teilnehmende teil (21 am Vormittag und 18 am Nachmittag). Teilnehmende waren überwiegend Studierende der Universität Kassel sowie einzelne Teilnehmende aus den ausgewählten Regionen, und aus der AGBe und der DBG. Ziel des Workshops war, die unterschiedlichen Wahrnehmungen von Oberflächenanlagen auch in Abhängigkeit der jeweiligen räumlichen Identität zu untersuchen. Im Workshop wurden verschiedene Modelle von Oberflächenanlagen im „virtual space“ dargestellt und von zwei Fragebögen begleitet (einen zur räumlichen Identifikation und einen zur Wahrnehmung der Anlagen) sowie danach eine Gruppendiskussion zur Wahrnehmung der Anlagen geführt. Derzeit werden die Ergebnisse des Workshops ausgewertet und mit den Erkenntnissen aus den Interviews verknüpft. Eine Publikation mit dem Arbeitstitel „Governing Nuclear Waste in the Long-term: On the Role of Place“ dazu ist in Vorbereitung.

TAP SAFE: Fortsetzung der fachlichen Unterstützung der Diskussion um inter- und transdisziplinäre Formate; im Hinblick auf die Diskussion „menschlicher Aktivitäten“ bezüglich Langzeitsicherheit und Safety Case ist zum Schwerpunkt Managementanforderungen und Lernen ein interdisziplinärer TRANSENS Bericht in Vorbereitung.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

TAP HAFF: In Modul 1 werden die identifizierten Teilprojekte bearbeitet. Die Arbeiten zu den Langfassungen der Pfadbeschreibungen werden fortgesetzt. In Modul 2 wird der Fokus auf der Auswertung des Workshops und der Verknüpfung mit den bisherigen Interviewergebnissen und Regionen-Workshops liegen sowie der Vorbereitung und Finalisierung von Publikationen und der Vorbereitung und Durchführung eines Reflexions-Workshops mit Praxispartner\*innen, welcher für das Quartal 3 geplant wird, liegen.

TAP SAFE: In SAFE 2 wird der TRANSENS Berichts zu Managementanforderungen und Lernen erstellt, welcher dann in einem weiteren Fokusgruppen-Format mit Expert\*innen des SC diskutiert werden soll.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Mbah, M; Bremer, S.; Leusmann, T. (2022): Spatial effects of surface facilities for final disposal: perceptions of the same and on place attachment – a transdisciplinary experimental setting. Vortrag bei der DAEF-Konferenz, Köln, 05.07.2022.

<b>Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer:</b> Technische Universität Berlin – Fachgebiet Wirtschafts – und Infrastrukturpolitik		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11849H</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: „Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt H		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung radioaktiver Abfälle		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2019 bis 30.09.2024	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2022 bis 31.12.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 362.577,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Christian von Hirschhausen	

### 1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

In TRANSENS soll transdisziplinär geforscht werden: Die interessierte Öffentlichkeit und andere außerakademische Akteure werden planvoll in Forschungskontexte, konkret in Transdisziplinäre Arbeitspakete (TAP) eingebunden.

Die Möglichkeiten transdisziplinärer Forschung in der nuklearen Entsorgung werden im Verbund systematisch reflektiert (Transdisziplinaritätsforschung). Spezielle Aktivitäten zielen auf Nachwuchsförderung und Kompetenzerhalt.

Dialog und Diskurs sind Schlüssel zur Verständigung. Wie muss der langwierige Prozess gestaltet werden, um dafür gute Bedingungen auf dem Entsorgungspfad zu schaffen? Das ist Gegenstand der transdisziplinären Forschung im TAP DIPRO.

Das Fachgebiet für Wirtschafts- und Infrastrukturpolitik erarbeitet im TAP DIPRO auf der Grundlage disziplinärer und interdisziplinärer Forschung eine Bewertung der volkswirtschaftlichen Vorteilhaftigkeit von Organisationsmodellen bzw. Governance-Strukturen an der Schnittstelle zwischen den Prozessen des Rückbaus, der Lagerung und der Standortsuche. Unter Berücksichtigung ingenieurwissenschaftlicher Erkenntnisse sollen mögliche Synergieeffekte und Hindernisse, die eventuell Verzögerungen oder Kostensteigerungen verursachen könnten, herausgearbeitet werden. Des Weiteren, erarbeitet bzw. eruiert das Fachgebiet, basierend auf Wissen über monetäre und nicht-monetäre Anreizstrukturen, in Kooperation mit anderen Partnern verschiedene Kompensationsszenarien und gesellschaftliche Möglichkeiten distributiver Gerechtigkeit im Umgang mit Lasten- und Verantwortungsverteilung

### 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

Das Arbeitsprogramm des TAP DIPRO gliedert sich in drei Module, wovon ein Modul der wissenschaftlichen Vorbereitung und ein Modul der Synthese dient. Im Zentrum steht das Praxismodul mit einer Reihe aus drei Workshops für Teilnehmer aus dem nicht-akademischen Bereich, in denen jeweils unterschiedliche Aspekte von Gerechtigkeit, Recht und Governance behandelt werden. Bei der Workshop-Organisation wechseln sich die DIPRO-Partner ab. Alle Projektpartner (im TAP DIPRO) sind bei den Workshops vertreten.

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- Einstellung und Einarbeitung des neuen Mitarbeiter Paul-Jonas Ummethun der sich schwerpunktmäßig mit der Datensuche zu internationalen Erfahrungen mit Endlagerfinanzierung und Organisationsmodellen beschäftigt.
- Am 15.11.2022 haben Prof. Dr. Christian von Hirschhausen und der Mitarbeiter Fabian Präger die Ringvorlesung im Rahmen des TAP EDU online gehalten. In der Vorlesung wurde das „Systemgut Atomkraft“ und „Politische Ökonomik – Atomwende“ behandelt.
- Prof. Dr. Christian von Hirschhausen hat am Teamleitertreffen in Hannover vom 12. – 13.07.2022 teilgenommen.
- Prof. Dr. Christian von Hirschhausen und der Mitarbeiter Fabian Präger haben am TRANSENS Arbeitstreffen vom 28. – 30.09.2022 in Kiel teilgenommen.
- Am 22.10.2022 wurde der Workshop B im Museum für Naturkunde in Berlin zum Thema: „Ungewissheiten in der Endlagerstandortsuche“ durchgeführt. Prof. Dr. Christian von Hirschhausen und der Mitarbeiter Fabian Präger waren bei der Organisation und der Durchführung in Kooperation mit dem Team der FU Berlin (Achim Brunnengräber) beteiligt.
- Am 3. – 4.11.2022 fand der Workshop „Zum Verhältnis von Politik und Wissenschaft in der Standortsuche für ein Endlager“ im Henry-Ford-Bau der FU Berlin statt. Sowohl Prof. Dr. Christian von Hirschhausen als auch der Mitarbeiter Fabian Präger haben an diesem Workshop teilgenommen.
- Am 25.11.2022 wurde der Workshop „Öffentlichkeitsbeteiligung bei der Standortsuche für ein Endlager für hochradioaktive Abfälle“ in den Räumen der TU Berlin durchgeführt. Das Team der TU Berlin hat die Organisation des Workshops übernommen und das Team der FU Berlin bei der Konzeption und Durchführung unterstützt.
- Der Mitarbeiter Fabian Präger nimmt regelmäßig an Telkos im Rahmen der DIPRO 4er Runde zur Planung und Vorbereitung von Entscheidungen Teil
- Prof. Dr. Christian von Hirschhausen und der Mitarbeiter Fabian Präger nehmen an den Terminen des DIPRO Korridors teil, in welchen unterschiedliche DIPRO Themen diskutiert werden. Am 01.11.2022 hat Prof. Dr. Christian von Hirschhausen einen Kommentarentwurf zur Diskussion gestellt.
- Der Mitarbeiter und TD-Beauftragte Fabian Präger arbeitet in regelmäßig stattfindenden Terminen zur Organisation der DIPRO Begleitgruppe (DBG) mit. Zusätzlich an verschiedenen Arbeitsterminen zusammen mit den Mitgliedern der DBG. Dabei werden Themen aus dem Themenkorridor der DBG behandelt, informelle „Teeküchen“ abgehalten und Organisationsthemen im Zusammenhang mit der DBG behandelt. Zuletzt wurde am 21.12.2022 die „DBG Jahresabschlussveranstaltung und Ausblick“ organisiert und durchgeführt.
- Fabian Präger und Prof. Dr. Christian von Hirschhausen haben das Papier „Die atompolitische Wende in Deutschland - Abkehr von der Atomkraft und gute Entsorgungspolitik als Gelingensbedingung für die Energiewende“ zusammen mit Achim Brunnengräber vom Team FFN final für eine Einreichung bei der Zeitschrift „Gaia“ erstellt.
- Das Fotoband-Projekt: Einfach mal abschalten...und dann?“ wurde zusammen mit Studierenden der TUB bearbeitet und für die Veröffentlichung beim Verlag „Oekom“ im Frühjahr 2023 vorbereitet.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Fortsetzung der inter- und transdisziplinären Diskursanalyse im Austausch mit TAP HAFF
- Austausch mit TAP HAFF zur Entsorgungspfade insbesondere über die Technologieoptionen und Pfadabhängigkeiten sowie Diskussion zur Atomwende
- Vertiefung der laufenden inter- und transdisziplinären Arbeiten in DIPRO

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Hirschhausen, Christian Von. 2022a. „Atomkraft: Wir brauchen einen Stresstest 2.0 für die Entsorgung radioaktiver Abfälle: Kommentar“. DIW Wochenbericht.

[https://doi.org/10.18723/DIW\\_WB:2022-40-3](https://doi.org/10.18723/DIW_WB:2022-40-3;);

Hirschhausen, Christian Von. 2022b. „Atomwende in Deutschland: Zwei peinliche Laufzeitverlängerungen zum Beginn der Narrenzeit: Kommentar“. [https://doi.org/10.18723/DIW\\_WB:2022-48-3](https://doi.org/10.18723/DIW_WB:2022-48-3).

<b>Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer:</b> TU Braunschweig, Postfach 3329, 38023 Braunschweig		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11849I</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt I		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Bereich 5: Wissensmanagement und sozio-technische Fragestellungen		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2019 bis 30.09.2024	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2022 bis 31.12.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 1.239.091,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr.-Ing. Stahlmann	

## 1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Im Verbundvorhaben TRANSENS wird erstmalig in Deutschland transdisziplinäre Forschung zur nuklearen Entsorgung in größerem Maßstab betrieben. Die interessierte Öffentlichkeit und andere außerakademische Akteure werden planvoll in Forschungskontexte, konkret in Transdisziplinäre Arbeitspakete (TAP) eingebunden:

- HAFF: Handlungsfähigkeit und Flexibilität in einem reversiblen Verfahren
- SAFE: Safety Case: Stakeholder-Perspektiven und Transdisziplinarität
- TRUST: Technik, Unsicherheiten, Komplexität und Vertrauen
- DIPRO: Dialoge und Prozessgestaltung in Wechselwirkung von Recht, Gerechtigkeit und Governance

## 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

In einem Verfahren, das die Rückholung eingelagerter Abfälle im Falle einer ungünstigen Entwicklung des Lagers vorsieht, muss man sich frühzeitig Gedanken machen über Monitoring-Strategien, Entscheidungswege, Entscheidungsträger und Verantwortlichkeiten. Dies ist Gegenstand des TAP TRUST.

Flexibilität statt linearer Ablauf des Verfahrens: schrittweises Vorgehen, Haltepunkte im Verfahrensablauf, die Option von begründeten Rückschritten und die Reaktion auf neue Forschungsergebnisse sind die Themen der transdisziplinären Forschung im TAP HAFF.

Dialog und Diskurs sind Schlüssel zur Verständigung. Wie muss der langwierige Prozess gestaltet werden, um dafür gute Bedingungen auf dem Entsorgungspfad zu schaffen? Das ist Gegenstand der transdisziplinären Forschung im TAP DIPRO.

Das IGG der TU Braunschweig ist in TAP TRUST eingebunden und bearbeitet Fragestellungen zu Monitoring und zur Akzeptabilität von Ungewissheiten während der Beobachtungsphase und einer Rückholung.

Das iBMB der TU Braunschweig ist in den TAPs HAFF und DIPRO eingebunden und entwickelt und visualisiert dazu idealtypische Konzepte für obertägige Anlagen von Endlagern. Dabei wird der komplette Lebenszyklus der Bauwerke betrachtet. Wesentliches Element ist dabei ein lernfähiges Lebenszyklusmanagementsystem.

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Das IGG hat den Demonstrator „Rückholung“ auf das Wirtsgestein Tonstein angepasst und mechanische Berechnungen durchgeführt. Auf dem zweiten AGBe-Workshop zum Thema „Rückholung, Ungewissheiten und Vertrauen“ vom 21.10.-22.10.2022 in Braunschweig wurde dieser vorgestellt und diskutiert. Der erste Tag hatte hierbei eine eher informierende Funktion, aufgelockert durch einen interaktiven Vortrag. Am zweiten Tag wurden u.a. mit der Methode des „rich pictures“ die Auswirkungen einer zu treffenden Entscheidung zur Rückholung auf die Gesellschaft diskutiert. Eines der Hauptergebnisse war dabei die Erkenntnis, dass es in der Gesellschaft auch potentielle Profiteure von einer Rückholung gibt.

Weiterhin wurde im Berichtszeitraum ein Interview zur Übertragbarkeit der anstehenden Rückholung radioaktiver Abfälle aus der Asse auf das neu zu planende Endlager für hoch radioaktive Abfälle geführt. Die Arbeiten zum Thema Ungewissheiten wurden zusammen mit den anderen beteiligten Projektpartner:innen fortgesetzt.

Das iBMB hat im TAP HAFF an mehreren Treffen teilgenommen und gut gangbare Entsorgungspfade identifiziert. Diese werden im Ungewissheiten-Sammelband-Beitrag „Trittsicherheit trotz Unsicherheit? Strategien der Ungewissheitsbewältigung bei nuklearen Entsorgungspfaden“ vorgestellt.

Am 26.10.2022 hat das iBMB gemeinsam mit dem Öko-Institut und der Universität Kassel das visuelle Experiment zur Raumwirkung von Oberflächenanlagen in Kassel durchgeführt. In dem dort vorhandenen „Virtual-Lab“ wurden die am iBMB entwickelten 3D-Modelle Teilnehmer:innen aus der Bevölkerung präsentiert und diskutiert.

Im Rahmen des TAP DIPRO hat das iBMB gemeinsam mit den Projektpartnern von der Universität Kiel vom 14.10.-15.10.2022 den 1. Workshop der Workshopreihe E mit dem Titel „Wie lange ist zwischen?“ zu Zukunftsfragen und der Standortverantwortung von Zwischenlagern im Kontext der Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Itzehoe und Brokdorf durchgeführt. In dieser Workshop-Reihe werden die notwendige Verlängerung und die mögliche Konsolidierung der Zwischenlagerung in der Verwirklichung eines Entsorgungspfades am Standort von Zwischenlagern untersucht sowie mit betroffenen Einwohnenden der Standortgemeinden und Beschäftigten von Entsorgungseinrichtungen diskutiert.

Darüber hinaus beteiligten sich das iBMB und das IGG unterstützend an der Durchführung des von der FU Berlin und TU Berlin durchgeführten DIPRO Workshops B zum Thema „(Nicht) Mein Endlager? Deine Perspektiven auf den Umgang mit hochradioaktiven Abfällen“ am 22.10.2022 im Naturkundemuseum in Berlin. Weiterhin haben das iBMB und das IGG am TRANSENS-Bearbeiter:innentreffen vom 07.-09.09.2022 sowie am TRANSENS-Arbeitstreffen vom 28.-30.09.2022 in Kiel teilgenommen.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Die Ergebnisse des Workshops mit der AGBe werden am IGG ausgewertet und sollen in Veröffentlichungen u.a. im Rahmen des Sammelbands der Bearbeiter\*innen einfließen. Die Fertigstellung des Sammelbands „Ungewissheiten“ ist voraussichtlich im Mai.

Im Rahmen der Workshopreihe E des TAP DIPRO haben die Vorbereitungen zur Durchführung des 2. Workshops bereits begonnen. Nach aktueller Planung wird der Workshop E2 vom 31.03.-01.04.2023 in Greifswald und Lubmin stattfinden und die Inhalte des Workshops E1 aufgreifen.

Weiterhin werden studentische Arbeiten zu den Themen Rückholung, Ungewissheiten, sowie Lebensdauermanagement und Dauerhaftigkeit mit dem Schwerpunkt auf Schädigungs- und Alterungsmechanismen bei Stahlbetonbauwerken betreut.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

M. Mbah, J. Neles, S. Bremer, T. Leusmann, D. Lowke (2022): Spatial effects of surface facilities for final disposal: Perceptions of the same and impact on place attachment – A transdisciplinary experimental setting, 3rd Conference on Key Topics in Deep Geological Disposal, Köln, 04.-06. Juli 2022

<b>Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer:</b> Universität Kassel, Arbeits- und Organisationspsychologie		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11849J</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt J		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Nukleare Entsorgungsforschung - BMWi		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2019 bis 30.09.2024		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2022 bis 31.12.2022
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 327.569,00 EUR		<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. habil. Oliver Sträter

### 1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

In TRANSENS soll transdisziplinär geforscht werden: Die interessierte Öffentlichkeit und andere außerakademische Akteure werden planvoll in Forschungskontexte, konkret in vier Transdisziplinäre Arbeitspakete (TAP) eingebunden. Die Möglichkeiten transdisziplinärer Forschung in der nuklearen Entsorgung werden im Verbund systematisch reflektiert; spezielle Aktivitäten zielen auf Nachwuchsförderung und Kompetenzerhalt.

Im TAP HAFF soll Flexibilität statt ein linearer Ablauf des Verfahrens erarbeitet werden durch ein schrittweises Vorgehen, mit Haltepunkten im Verfahrensablauf, der Option von begründeten Rückschritten und Reaktion auf neue Forschungsergebnisse.

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

### 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

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

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

sowie

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

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

HAFF AP 1: Das entwickelte Fragebogenverfahren zur Bewertung von Entscheidungsqualität wurde auf dem BASE Workshop ‚Trust in Models‘ vorgestellt und fand große Resonanz bei den Modellierungs-Akteuren.

HAFF AP 2: Die ausgearbeiteten Beiträge zur Kommunikationskultur für spezifische Anwendungsszenarien im Rahmen der Endlagersuche (beispielsweise: Bürgerbeteiligung, Präsentation von Forschungsergebnissen, Umgang mit Unsicherheiten und Ungewissheiten) wurden auf der TRANSENS-Summer-School in 2022 vorgestellt und in Rahmen von Rollenspielen validiert.

HAFF AP 3: Die methodische Integration von Kommunikationskultur und TD Ansatz auf Basis der Ergebnisse des BASE Workshop ‚Transdisziplinärer Prozess und psychologisch resiliente Kommunikation in der Interaktion der Akteure‘ wurde im Visuellen Experiment zu Fragestellungen zum Raumempfinden angewandt und validiert.

SAFE AP 1: Weitere Vorbereiten eines Berichtes mit Empfehlungen für die Berücksichtigung der menschlichen Zuverlässigkeit beim Umgang mit den BMU Sicherheitsanforderungen mit dem Ziel der Veröffentlichung eines Sammelbandes.

SAFE AP 2: Demonstration der Aspekte menschlicher Zuverlässigkeit anhand ausgewählter Anforderungen aus der Synopse zu den BMU Sicherheitsanforderungen (als Bestandteil des Berichtes zu AP 1).

SAFE AP 3: Anwendung der Methodik zur Bewertung des Einflusses menschlicher Zuverlässigkeit bei beispielhaften Endlager-Fragestellungen in der Modellierung (mit Vortrag auf dem Trust in Models Workshop der BASE).

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

HAFF AP 1: Das entwickelte Fragebogenverfahren zur Bewertung von Entscheidungsqualität wird für weitere Verwendung an Akteure und Interessierte verteilt mit dem Ziel der Datenerhebung über Entscheidungsqualitäten.

HAFF AP 2: Die erzielten Ergebnisse zur Kommunikationskultur werden in den aktuellen Prozess der Endlager-suche eingebracht und auf der kommenden TRANSENS-Summer-School in 2023 dargestellt.

HAFF AP 3: Die Aspekte der Kommunikationskultur aus dem Visuellen Experiment zu Fragestellungen zum Raumempfinden werden ausgewertet (Gemeinsam mit Oeko Institut und TU Braunschweig).

SAFE AP 1: Zwischenergebnisse des Berichtes mit Empfehlungen für die Berücksichtigung der menschlichen Zuverlässigkeit beim Umgang mit den BMU Sicherheitsanforderungen werden auf der Tagung Technische Zuverlässigkeit in einer Keynote vorgestellt.

SAFE AP 2: Aspekte menschlicher Zuverlässigkeit anhand ausgewählter Anforderungen aus der Synopse zu den BMU Sicherheitsanforderungen werden zur öffentlichen Diskussion gestellt (als Bestandteil des AP 1).

SAFE AP 3: Die Methodik zur Bewertung des Einflusses menschlicher Zuverlässigkeit bei Endlager-Fragestellungen in der Modellierung wird weiterentwickelt (aus Basis des Vortrages auf dem Trust in Models Workshop der BASE) und soll zu einem TRANSENS-Sammelband führen (Mit HAFF AP 1). Dort wird auch der ursprünglich anvisierte Beitrag zum Sammelband Ungewissheiten des TRANSENS Projektes (Grenzen des Barrieredenkens und Faktor Mensch) integriert.

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

- Smeddinck, U., Röhlig, K., & Sträter, O. (2022) Positionspapier zum Lernenden Verfahren. Berliner Wissenschaftsverlag. Berlin.
- Sträter, O. (2022) Uncertainties in modelling due to human factors. BASE Workshop Trust in Models. BASE. Berlin
- Sträter, O. (2022) Risk Communication. Psychological aspects of dealing mindfully with each other in high risk scenarios. TRANSENS Summer School. Bonn.
- Othmer, A. & Muxlhanga, H., Lux, K.-H. & Sträter, O. (2023, in press). Umgang mit Modellierungsungewissheiten. Beitrag zum Sammelband ‚Ungewissheiten‘ des TRANSENS Projektes.
- Sträter, O. (2023, in Vorbereitung). Low Probability Ereignisse als Resultat unberücksichtigter Wechselwirkungen zwischen menschlicher und technischer Zuverlässigkeit und deren Bedeutung für die Endlagerung hochradioaktive Abfälle und autonomer Systeme. Key-Note. TTZ 23. Nürtingen.

<b>Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer:</b> Forschungszentrum Jülich GmbH, 52425 Jülich		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 W 6279</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Neu- und Weiterentwicklung von Konzepten, Methoden und Techniken für die internationale Kernmaterialüberwachung, insbesondere im Rahmen der nuklearen Entsorgung (SAFE-GUARDS-3)		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Bereich D3: Kernmaterialüberwachung (Safeguards), Feld: 3.1		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.07.2019 bis 30.06.2023	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2022 bis 31.12.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 889.554,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Irmgard Niemeyer	

## 1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Die Bundesregierung soll in ihren Bemühungen unterstützt werden, in Zusammenarbeit mit der IAEO und Euratom das Verifikationssystem zur Nichtweiterverbreitung von Kernwaffen weiterzuentwickeln. Neben der ständigen Verbesserung der Effektivität des Überwachungssystems spielen Gesichtspunkte des Kontrollaufwandes (Effizienz) eine zentrale Rolle. Dieser Aspekt hat besondere Bedeutung bei der erweiterten Aufgabenstellung der IAEO durch das Zusatzprotokoll im Hinblick auf die Entdeckung un-deklarerter Nuklearmaterialien und Nuklearaktivitäten.

Das Vorhaben baut auf den Ergebnissen der vorangegangenen Vorhaben 02W6184, 02W6218, 02W6232, 02W6243, 02W6259 und 02W6263 auf. Die Arbeiten haben Bezug zum BMWi-Förderkonzept „Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle - (2015-2018)“, zu den strategischen Zielen des 7. Energieforschungsprogramm der Bundesregierung (2018) im Rahmen der Entsorgungs- und Endlagerforschung, zum Nationalen Entsorgungsprogramm (2015) sowie zum BMWi-IAEA Joint Programme. Die Arbeiten werden in enger Abstimmung zwischen Regierung, den Kontrollbehörden IAEO und Euratom, Industrie sowie Forschung und Entwicklung geplant und durchgeführt.

## 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

- 6.1 Konzepte zur Kernmaterialüberwachung
  - AP 6.1.1 Safeguards-Konzepte für verlängerte Zwischenlagerzeiten
  - AP 6.1.2 Safeguards-Konzepte für unterschiedliche Endlagerkonzepte
  - AP 6.1.3 Safeguards-Konzepte für kerntechnische Anlagen im Rückbau
- 6.2 Methoden und Techniken zur Kernmaterialüberwachung
  - AP 6.2.1 Einschluss und Überwachung
  - AP 6.2.2 Erneute Behälterüberprüfung (Re-Verifikation)
  - AP 6.2.3 Methoden zur Entdeckung von unabhängigen Bergbauaktivitäten und Hohlräumen
  - AP 6.2.4 Geoinformationstechnologien
- 6.3 Kooperation, Kommunikation, Kapazitätsaufbau zur internationalen Kernmaterialüberw.
  - AP 6.3.1 Kooperation mit der Deutschen Gesellschaft für Auswärtige Politik (DGAP)
  - AP 6.3.2 Pflege des nationalen Safeguards-Internet-Portals
  - AP 6.3.3 Nationale Gremien
  - AP 6.3.4 Internationale Gremien

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP 6.1.1: Erarbeitung der konzeptionellen und technischen Anforderungen an die Safeguardsüberwachung der Zwischenlager in Deutschland bis mindestens 2050
- AP 6.1.2: Vorbereitung eines Promotionsprojekts zum Einsatz eines Digitalen Zwillings im Rahmen der Safeguardsüberwachung eines HAW-Endlagers
- AP 6.1.3: Beratung von Anlagenbetreibern zur Safeguardsüberwachung von Anlagen im Rückbau
- AP 6.2.1: Durchführung und Auswertung von Feldtests zur Eignung von 2D und 3D Laserscanning im Rahmen von Einschluss und Überwachung der Brennelementbehälter in den Zwischenlagern
- AP 6.2.2: Vorbereitung eines Feldtests zur Eignung der Myonen-Tomographie zur Re-Verifikation von Brennelementbehältern in den Zwischenlagern
- AP 6.2.3: Durchführung eines Promotionsprojekts zur multitemporalen Satellitenbildanalyse im Rahmen der Safeguardsüberwachung von kerntechnischen Anlagen
- AP 6.3.1: Nachbereitung der Arbeitsgruppe für Nukleartechnologie und Nonproliferation (AG2N)
- AP 6.3.3: Mitarbeit in der Arbeitsgemeinschaft Kernmaterialüberwachung (AKÜ) sowie im Arbeitskreis Spaltstoffüberwachung des vgb energy e.V.
- AP 6.3.4: ESARDA: Leitung von zwei Arbeitsgruppen und Mitarbeit in weiteren Arbeitsgruppen; INMM: Leitung der 'International Safeguards Division'; INMM/ESARDA: Mitarbeit bei der Vorbereitung der zweiten gemeinsamen Jahrestagung, Wien, Mai 2023

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- AP 6.1.1: Fortsetzung der o.g. Arbeiten
- AP 6.1.2: Beginn des o.g. Promotionsprojekts
- AP 6.1.3: Fortsetzung der o.g. Arbeiten
- AP 6.2.1: Abschließende Bewertung der o.g. Feldtests
- AP 6.2.2: Durchführung und Auswertung des o.g. Feldtests
- AP 6.2.3: Durchführung eines Fallbeispiels zum Monitoring von HAW-Endlagerstandorten
- AP 6.3.1: keine
- AP 6.3.3: Fortsetzung der o.g. Arbeiten
- AP 6.3.4: Fortsetzung der o.g. Arbeiten

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

- Thompson, L. et al. 2022. The Use of Muon Tomography in Safeguarding Nuclear Geological Disposal Facilities. *Journal of Advanced Instrumentation in Science* 284, 2022. DOI:<https://doi.org/10.31526/jais.2022.284>.
- Tagungsband INMM 63rd Annual Meeting, Virtual, USA, 24 Jul 2022 - 28 Jul 2022
  - Beumer, B., Niemeyer, I. A Deep Learning Approach for Safeguards-relevant Change Detection using Sentinel-2 Imagery.
- Tagungsband IAEA Symposium on International Safeguards, Vienna, Austria, 31 Oct 2022 - 4 Nov 2022
  - K. Aymanns et al. Experiences in Safeguarding Nuclear Reactors under Decommissioning in Germany
  - K. Aymanns et al. New Technologies for Safeguarding Spent Fuel Storage Facilities
  - L. Beumer et al., Change Detection of Nuclear Facilities - Automatic Classification of Sentinel-1 & 2 Data using Deep Learning
  - L. Thompson et al. The Application of Muon Tomography to Safety and Safeguarding in Geological Repositories
  - G. Bonomi et al., MUTOMCA: An Experiment to Investigate Spent Fuel Casks with Muon Tomography
  - R. Rossa et al., An Innovative Training Course on Sampling Plans using Virtual Reality

<b>Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer:</b> RWTH Aachen		<b>Förderkennzeichen:</b> 02 W 6281	
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Antineutrino-Detektion zur Überwachung radioaktiver Abfälle (NU-SAFEGUARDS)			
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> D3 Kernmaterialüberwachung (Safeguards), Felder D3.1 und D3.2			
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.05.2022 bis 30.04.2025		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2022 bis 31.12.2022	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 344.338,00 EUR		<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Malte Götsche	

## 1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Es gibt bislang keine Techniken, um die hochradioaktiven Abfälle in Endlagern nach deren Einschluss direkt zu verifizieren. Bisherige Ansätze beruhen auf einem „black box“ Ansatz, bei dem unter Nutzung verschiedener „Containment and Surveillance“ Verfahren überprüft werden soll, dass kein Zugang zum Endlager geschaffen wird. Da einzelne Techniken jedoch ausfallen können, ist der Einsatz redundanter Verfahren notwendig. Entgegen der „black box“-Annahme gibt es durchaus Teilchen, die von den radioaktiven Abfällen emittiert werden und von Wirtsgesteinen nicht abgeschirmt werden: Antineutrinos. Diese entstehen aus Zerfallsprozessen in den Abfällen. Deren Detektion kann also Aufschluss über das Inventar geben. Auch zur Überwachung von Zwischenlagern könnte sich die Antineutrino-Detektion eignen. Wir werden mit diesem Vorhaben die erste detaillierte angewandte Studie zu Antineutrino-Monitoring als Fernüberwachungs-Tool von Endlagern durchführen. Zur Erhöhung der Redundanz von Safeguards-Maßnahmen soll dieser Ansatz darüber hinaus auch für die Überwachung von Zwischenlagern betrachtet werden. Das Ziel ist dabei, die prinzipielle Machbarkeit sowie konkrete Möglichkeiten und Grenzen entsprechender Detektionsverfahren zu erfassen.

## 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

- AP1: Untersuchung verschiedener Detektortypen
- AP2: Modellierung verschiedener Endlager- und Zwischenlagerkonfigurationen
- AP3: Abschätzungen der erwarteten Signal- und Untergrundraten
- AP4: Entwicklung konkreter Detektordesigns und Auswertemethoden
- AP5: Definition konkreter Einsatzszenarien für Safeguards und Sicherheit
- AP6: Einbettung von Antineutrino-Monitoring in Safeguards-Gesamtkonzept

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Die Arbeit am Projekt wurde am 01.08.2022 aufgenommen, mit der Untersuchung verschiedener Detektortechnologien im Rahmen von AP1. Hierbei wurden vor allem folgende Ansätze zur Detektion von Antineutrinos verglichen: Flüssigszintillatoren, Plastikszintillatoren, Cherenkov-Tanks, neuartige undurchsichtige Szintillatoren, Zeitprojektionskammern (TPC: Time Projection Chamber) mit flüssigem Argon oder organischen dielektrischen Flüssigkeiten (LOR: Liquid Organic) und kohärente Neutrino-Kernstreuung (CEvNS: Coherent Elastic Neutrino-Nucleus Scattering).

Dieser Vergleich begann mit einer Literaturstudie existierender Experimente sowie Konzeptpapiere von Experimenten die momentan in der Entwicklung sind. Darauf basierend wurden für ein festes Detektionsvolumen geschätzte Signalaraten ermittelt, bekannte Implementationsschwierigkeiten dokumentiert und – mittels Expertengesprächen und dem Abgleich mit Berichten der IAEA – die technische Machbarkeit an nuklearen Anlagen bewertet.

Basierend auf diesen Vergleichskriterien werden nun insb. Plastikszintillator-Detektoren und LOR-TPC-Detektoren weiter untersucht. Plastikszintillatoren verbinden eine einfache Handhabung mit hoher Technologiereife, während LOR-TPCs in der Lage sind präzisere Ereignis- und Energierekonstruktion zu leisten als die anderen verglichenen Technologien. Beide Technologien können mit der vorhandenen Expertise via Computersimulationen modelliert werden, mittels GEANT4. Im Rahmen dieses Projekts wurde auch eine bestehende GEANT4-Simulation für einen LOR-TPC Prototypen weiterentwickelt. Es wird zudem auch eine weitere Untersuchung der undurchsichtigen Szintillatoren empfohlen.

Darauffolgend begann die Arbeit an AP2. Zur Modellierung verschiedener Zwischen- und Endlagerszenarien ist es notwendig die Antineutrino-Emissionen von Kernabfällen zu simulieren. Hierzu wird die ONIX-Software benutzt, um mit Abbrandsimulationen die isotopische Zusammensetzung von Brennelementen zu berechnen, hierfür wurde auch auf die Expertise unserer Gruppe mit ONIX zurückgegriffen. Die Isotope, die maßgebend zur Antineutrino-Emission in Kernabfällen über der Detektionsschwelle der untersuchten Detektoren beitragen, wurden identifiziert ( $^{90}\text{Sr}$ ,  $^{106}\text{Ru}$ ,  $^{144}\text{Ce}$ , sowie  $^{88}\text{Kr}$  und  $^{137}\text{Cs}$ ) und mittels Zerfallsberechnungen wird das Antineutrino-Spektrum generiert.

Diese Methode wurde eingesetzt, um ein Beispielspektrum für einen Reaktortyp zu modellieren und kann nun als Basis genutzt werden um die Antineutrino-Emissionen für verschiedene Lagerkonfigurationen (Menge, Alter und Position von Brennelementen) zu simulieren.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Die Literaturstudie und der technische Vergleich von Detektortechnologien sind abgeschlossen und eine Vorauswahl von Technologien wurde getroffen. Weitere vertiefende Expertengespräche sind für Anfang 2023 geplant (IAEA Workshop zu Antineutrino-Daten, Lehrstuhl für Endlagersicherheit der RWTH Aachen) um die bisherigen Erkenntnisse in AP1 zu validieren. Es ist geplant die LiquidO-Kollaboration zu kontaktieren um weitere Erkenntnisse über die Eigenschaften und Entwicklungsstand undurchsichtiger Szintillatoren zu sammeln.

Der Fokus für die Arbeit im nächsten Berichtszeitraum (1H2023) liegt nun auf AP 2 und 3. Antineutrino-Spektren für AP2 wurden bereits generiert und werden nun eingesetzt, um spezifische Lagerkonfigurationen zu simulieren, inklusive einer erwarteten Signalarate in einem Beispieldetektor, basierend auf den Ergebnissen von AP1. Im Rahmen von AP2 werden auch erwartete Untergrundraten für die Lagerkonfigurationen katalogisiert als Vorarbeit von AP3. Hierzu ist geplant, existierende Studien und Methoden zu Untergrundraten in unterirdischen Laboren für die AP2 Lagerkonfigurationen anzupassen um, kombiniert mit den Ergebnissen von AP1/AP2, sowohl Signal- als auch Untergrundraten abzuschätzen.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

T. Radermacher et al, "Antineutrino Monitoring for Safeguarding Spent Fuel". Conference Proceedings of the Symposium on International Safeguards: Reflecting on the Past and Anticipating the Future, IAEA (2022).



### **3 Information zu Publikationen sowie zu Aus- und Weiterbildung**

In den Halbjahresberichten werden in kurzgefasster Form die Ergebnisse der aktuell bewilligten Forschungsvorhaben dargestellt. Vorhabenrelevante Publikationen werden aufgelistet, soweit es der Platz zulässt; es ist aber nicht immer möglich, alle im Rahmen eines FuE-Vorhabens erfolgten Veröffentlichungen (schriftlich oder mündlich) aufzunehmen. Ferner sind Informationen zur Aus- und Weiterbildung wissenschaftlichen Nachwuchses bei den Forschungseinrichtungen nicht explizit abgefragt und ausgewiesen worden.

Es wurde daher beginnend mit dem Jahr 2015 vereinbart, zukünftig Angaben zur Gesamtzahl der Publikationen und zu Ausbildungsaspekten zu machen. Die entsprechenden Daten werden von den Forschungseinrichtungen zur Verfügung gestellt.

Die zusammenfassende Darstellung erfolgt im jeweils zweiten Halbjahresbericht eines Kalenderjahres. Damit soll zusätzlich zur Kurzdarstellung der Vorhabenergebnisse in den Fortschrittsberichten dokumentiert werden, dass und wie die FuE-Ergebnisse verbreitet werden.

#### **Publikationen**

Im Jahr 2022 erfolgten in rund 90 Veröffentlichungen in begutachteten Journalen, in Form von Schlussberichten, Doktor-, Master-, Bachelor- und Studienarbeiten oder in sonstiger schriftlicher Form die Publikation von Ergebnissen von FuE-Vorhaben durch die geförderten Forschungseinrichtungen.

Zudem wurden im Jahr 2022 rund 122 Vorträge auf Konferenzen, bei Workshops und sonstigen Veranstaltungen gehalten und Ergebnisse bzw. Zwischenergebnisse präsentiert.

#### **Aus- und Weiterbildung**

Ein strategisches Forschungsziel der BMUV-Förderung ist die Bereitstellung von Expertise und Wissen, der Erhalt und Ausbau wissenschaftlich-technischer Kompetenz und als wichtiges Element dafür die Unterstützung und Förderung des wissenschaftlichen Nachwuchses.

Die Aus- und Weiterbildung von Post-Docs, Doktoranden, Masterstudenten erfolgt nahezu ausschließlich durch Universitäten und Einrichtungen der Helmholtz Gemeinschaft. Gleichwohl erfolgt in einzelnen Fällen die Ausbildung und Finanzierung wissenschaftlichen Nachwuchses im Rahmen einer wissenschaftlichen Kooperation zwischen Universitäten und Unternehmen.

Im Jahr 2022 waren in den hier aufgeführten FuE-Vorhaben 57 Nachwuchswissenschaftlerinnen und Nachwuchswissenschaftler in FuE-Vorhaben eingebunden.



## 4 Verzeichnis der Forschungsstellen

### BGE TECHNOLOGY GmbH, Eschenstraße 55, 31224 Peine

02 E 11577A	Verbundprojekt: Sicherheitsanalytische Untersuchungen zu Endlagersystemen im Kristallin (SUSE), Teilprojekt A	 22
02 E 11839	Entwicklung eines Leitfadens zur Auslegung und zum Nachweis von geotechnischen Barrieren für ein HAW Endlager in Salzformationen (RANGERS)	 56
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	 92
02 E 11900	Langzeitsicherheit von Verschlussystemen in Schächten und Rampen im Vergleich (LARYSSA)	 96
02 E 11951B	Verbundprojekt: Kompaktion von Salzgrus für den sicheren Einschluss - Phase 2 (KOMPASS II), Teilprojekt B	 112
02 E 11971B	Verbundprojekt: Anwendbarkeit von Niedertemperatur-Salzschmelzen für Verschlussmaßnahmen von Endlagern für radioaktiver Abfälle im Wirtsgestein Salz (SalVE), Teilprojekt B	 122
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. A	 144

### Christian-Albrechts-Universität zu Kiel, Christian-Albrecht-Platz 4, 24118 Kiel

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

### Dr. Andreas Hampel, Grünberger Str. 56, 55129 Mainz

02 E 11446A	Verbundprojekt: Weiterentwicklung und Qualifizierung der gebirgsmechanischen Modellierung für die HAW-Endlagerung im Steinsalz (WEIMOS), Teilprojekt A	 18
-------------	--	--

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

02 E 11921A	Verbundprojekt: Untersuchungen zur SEParation von AMericiium aus hochradioaktiven Abfalllösungen (SEPAM), Teilprojekt A	 102
02 W 6279	Neu- und Weiterentwicklung von Konzepten, Methoden und Techniken für die internationale Kernmaterialüberwachung, insbesondere im Rahmen der nuklearen Entsorgung (SAFEGUARDS-3)	 172

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

<b>02 E 11849C</b>	Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt C	 156
--------------------	--	---

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

<b>02 E 11759A</b>	Verbundprojekt: Grimsel Felslabor: In-situ-Experimente zur Bentonit Langzeit-Stabilität und der Radionuklidmobilität an der Grenzfläche Bentonit - Kristallin (KOLLORADO-e3), Teilprojekt A	 34
<b>02 E 11911B</b>	Verbundprojekt: Vorhersage der heterogenen Radionuklidsorption auf Kluft- und Störungsflächen in granitischen Gesteinen: Parametrisierung und Validierung verbesserter reaktiver Transportmodelle (WTZ-Granit), Teilprojekt B	 100

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

<b>02 E 11466</b>	Entwicklung von Rechenmodulen für die integrierte Modellierung von Transportprozessen im einschlusswirksamen Gebirgsbereich (RepoTREND+)	 20
<b>02 E 11577B</b>	Verbundprojekt: Sicherheitsanalytische Untersuchungen zu Endlagersystemen im Kristallin (SUSE), Teilprojekt B	 24
<b>02 E 11627</b>	Arteigene Versatz- und Verschlussmaterialien für die Endlagerung hochradioaktiver Abfälle in Tonformationen (AVET)	 26
<b>02 E 11668A</b>	Verbundprojekt: Smart-K <sub>d</sub> in der Langzeitsicherheitsanalyse - Anwendungen (SMILE), Teilprojekt A	 28
<b>02 E 11698</b>	Untersuchung thermisch-hydraulisch-mechanisch-chemischer Einwirkungen auf zementbasierte Dichtelemente (THYMECZ)	 32
<b>02 E 11759C</b>	Verbundprojekt: Grimsel Felslabor: In-situ-Experimente zur Bentonit Langzeit-Stabilität und der Radionuklidmobilität an der Grenzfläche Bentonit - Kristallin (KOLLORADO-e3), Teilprojekt C	 38
<b>02 E 11799B</b>	Verbundprojekt: Vertikales hydraulisches Dichtsystem nach dem Sandwich-Prinzip - Hauptprojekt (SANDWICH-HP), Teilprojekt B	 44
<b>02 E 11809A</b>	Verbundprojekt: Weiterentwicklung von d <sup>3f++</sup> : Hydrogeologische Modellierung im regionalen Maßstab (HYMNE), Teilprojekt A	 48
<b>02 E 11819</b>	Mineralumwandlung und Sorption bei erhöhten Temperaturen in geklüfteten Kristallingesteinen und Barrierematerial (MUSE)	 52
<b>02 E 11829</b>	Tonsteinforschung im Felslabor Mont Terri ab Phase 25 (MonTe-25)	 54
<b>02 E 11870A</b>	Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt A	 78
<b>02 E 11880</b>	Sicherheitsrelevante Untersuchungen zur Bentonitaufsättigung (SIRUB)	 90

<b>02 E 11941</b>	Wissenschaftliche Grundlagen zum Nachweis der Langzeitsicherheit von Endlagern (WiGru-9)	 108
<b>02 E 11951A</b>	Verbundprojekt: Kompaktion von Salzgrus für den sicheren Einschluss - Phase 2 (KOMPASS II), Teilprojekt A	 110
<b>02 E 11981A</b>	Verbundprojekt: Implementierung eines Monitoringsystems zur Evaluierung der Korrosionsvorgänge an Behältermaterialien in Bentonit-basierten Endlagerkonzepten (IMKORB), Teilprojekt A	 124
<b>02 E 12012A</b>	Verbundprojekt: Weiterentwicklung von d <sup>3f++</sup> : Hydrogeologische Modellierung im regionalen Maßstab (HYMNE II), Teilprojekt A	 136
<b>02 E 12032</b>	Methoden zur experimentellen und numerischen Analyse der geologischen Barriere eines Endlagers in tonreichen Sedimentgesteinsformationen (MAGNUS)	 140

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

<b>02 E 11769B</b>	Verbundprojekt: MgO-Spritzbeton für Streckenverschlüsse für HAW-Endlager im Steinsalz (MgO-S3), Teilprojekt B	 40
<b>02 E 11860B</b>	Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt B	 64
<b>02 E 11870B</b>	Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt B	 80
<b>02 E 11911A</b>	Verbundprojekt: Vorhersage der heterogenen Radionuklidsorption auf Kluft- und Störungsflächen in granitischen Gesteinen: Parametrisierung und Validierung verbesserter reaktiver Transportmodelle (WTZ-Granit), Teilprojekt A	 98
<b>02 E 12072B</b>	Verbundprojekt: MgO-Beton C3 als langzeitbeständiges und schnellwirksames Verschlusselement für Schachtverschlüsse zukünftiger HAW-Endlager im Salinar (MgO-C3), Teilprojekt B	 148

**Helmholtz-Zentrum für Umweltforschung GmbH – UFZ -, Permoserstr. 15, 04318 Leipzig**

<b>02 E 11850A</b>	Verbundprojekt: Deutsch-chinesische Entsorgungsforschung – Pilotprojekt: Reanalysis of BRIUG THM Mock-up Test (ELF-China-Pilot), Teilprojekt A	 58
--------------------	--	--

**IfG Institut für Gebirgsmechanik GmbH, Friederikenstr. 60, 04279 Leipzig**

<b>02 E 11951C</b>	Verbundprojekt: Kompaktion von Salzgrus für den sicheren Einschluss - Phase 2 (KOMPASS II), Teilprojekt C	 114
--------------------	---	---

**Johannes Gutenberg-Universität Mainz, Saarstraße 21, 55122 Mainz**

<b>02 E 11860A</b>	Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt A	 62
--------------------	--	--

**Johann Wolfgang Goethe-Universität Frankfurt am Main, Senckenberganlage 31,  
60325 Frankfurt am Main**

- |                    |   |  |
|--------------------|---|--|
| <b>02 E 11809B</b> | Verbundprojekt: Weiterentwicklung von d <sup>3f++</sup> : Hydrogeologische Modellierung im regionalen Maßstab (HYMNE), Teilprojekt B    | <br>50  |
| <b>02 E 12012B</b> | Verbundprojekt: Weiterentwicklung von d <sup>3f++</sup> : Hydrogeologische Modellierung im regionalen Maßstab (HYMNE II), Teilprojekt B | <br>138 |

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

- |                    |  |  |
|--------------------|--|--|
| <b>02 E 11799A</b> | Verbundprojekt: Vertikales hydraulisches Dichtsystem nach dem Sandwich-Prinzip - Hauptprojekt (SANDWICH-HP), Teilprojekt A | <br>42  |
| <b>02 E 12001A</b> | Verbundprojekt: Sandwich Support Projekt 1: Heterogene Bentonithydratation (SANDWICH-SP1), Teilprojekt A                   | <br>132 |

**Leibniz Universität Hannover, Welfengarten 1, 30167 Hannover**

- |                    |   |  |
|--------------------|---|--|
| <b>02 E 11849F</b> | Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt F  | <br>162   |
| <b>02 E 11870E</b> | Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt E  | <br>86    |
| <b>02 E 11870F</b> | Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt F  | <br>88  |
| <b>02 E 11981C</b> | Verbundprojekt: Implementierung eines Monitoringsystems zur Evaluierung der Korrosionsvorgänge an Behältermaterialien in Bentonit-basierten Endlagerkonzepten (IMKORB), Teilprojekt C | <br>128 |

**Öko-Institut. Institut für angewandte Ökologie e. V., Merzhauser Str. 173,  
79100 Freiburg**

- |                    |  |  |
|--------------------|--|--|
| <b>02 E 11849G</b> | Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt G | <br>164 |
|--------------------|--|--|

**Rheinisch-Westfälische Technische Hochschule Aachen, Templergraben55,  
52062 Aachen**

- |                   |  |  |
|-------------------|--|--|
| <b>02 E 11931</b> | Einfluss der thermischen Reife auf die gekoppelten hydro-mechanischen Eigenschaften niedrig-durchlässiger Tonsteine – Feld & Laborskala (Maturity) | <br>106 |
| <b>02 W 6281</b>  | Antineutrino-Detektion zur Überwachung radioaktiver Abfälle (NU-SAFEGUARDS)  | <br>174 |

**Ruhr-Universität Bochum, Universitätsstr. 150, 44801 Bochum**

- |                    |  |  |
|--------------------|--|--|
| <b>02 E 12001B</b> | Verbundprojekt: Sandwich Support Projekt 1: Heterogene Bentonithydratation (SANDWICH-SP1), Teilprojekt B | <br>134 |
|--------------------|--|--|

**Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT),**

**Hermann-von-Helmholtz-Platz 1, 76344 Eggenstein-Leopoldshafen**

<b>02 E 11759B</b>	Verbundprojekt: Grimsel Felslabor: In-situ-Experimente zur Bentonit Langzeit-Stabilität und der Radionuklidmobilität an der Grenzfläche Bentonit - Kristallin (KOLLORADO-e3), Teilprojekt B	 36
<b>02 E 11849D</b>	Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt D	 158
<b>02 E 11849E</b>	Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt E	 160
<b>02 E 11850F</b>	Verbundprojekt: Deutsch-chinesische Entsorgungsforschung – Pilotprojekt: Reanalysis of BRIUG THM Mock-up Test (ELF-China-Pilot), Teilprojekt F	 60
<b>02 E 11860C</b>	Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt C	 66
<b>02 E 11921B</b>	Verbundprojekt: Untersuchungen zur SEParation von AMericiuM aus hochradioaktiven Abfalllösungen (SEPAM), Teilprojekt B	 104
<b>02 E 11981B</b>	Verbundprojekt: Implementierung eines Monitoringsystems zur Evaluierung der Korrosionsvorgänge an Behältermaterialien in Bentonit-basierten Endlagerkonzepten (IMKORB), Teilprojekt B	 126

**Technische Universität Bergakademie Freiberg, Akademiestraße 6, 09599 Freiberg**

<b>02 E 11799C</b>	Verbundprojekt: Vertikales hydraulisches Dichtsystem nach dem Sandwich-Prinzip - Hauptprojekt (SANDWICH-HP), Teilprojekt C	 46
<b>02 E 11890B</b>	Verbundprojekt: Entwicklung und Test eines erweiterten Hoek-Brown Stoffmodells zur Berücksichtigung anisotropen Festigkeitsverhaltens bei der Anwendung der Integritätskriterien für kristalline Wirtsgesteine (BARIK), Teilprojekt B	 94
<b>02 E 11961</b>	Entwicklung eines salzgrusbasierten Versatzkonzepts unter der Option Rückholbarkeit - Phase I (SAVER)	 118
<b>02 E 11971A</b>	Verbundprojekt: Anwendbarkeit von Niedertemperatur-Salzschmelzen für Verschlussmaßnahmen von Endlagern für radioaktiver Abfälle im Wirtsgestein Salz (SalVE), Teilprojekt A	 120
<b>02 E 12072A</b>	Verbundprojekt: MgO-Beton C3 als langzeitbeständiges und schnellwirksames Verschlusselement für Schachtverschlüsse zukünftiger HAW-Endlager im Salinar (MgO-C3), Teilprojekt A	 146

**Technische Universität Berlin, Straße des 17. Juni 135, 10623 Berlin**

<b>02 E 11849H</b>	Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt H	 166
--------------------	--	--

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

<b>02 E 11849I</b>	Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt I	 168
--------------------	--	---

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

<b>02 E 11688</b>	Langzeitsicheres Abdichtungselement aus Salzschnittblöcken - Durchführung, Auswertung und Reanalyse von THM-Versuchen (Salzschnittblöcke III)	 30
-------------------	---	--

<b>02 E 11849A</b>	Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt A	 152
--------------------	--	---

<b>02 E 11951D</b>	Verbundprojekt: Kompaktion von Salzgrus für den sicheren Einschluss - Phase 2 (KOMPASS II), Teilprojekt D	 116
--------------------	---	---

<b>02 E 11991</b>	Entwicklung und Validation einer neuartigen Versuchstechnik für triaxiale Kriechversuche bei geringer deviatorischer Belastung (KRIECHTECH)	 130
-------------------	---	---

**Technische Universität Dresden, Helmholtzstr. 10, 01069 Dresden**

<b>02 E 11860G</b>	Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt G	 74
--------------------	--	--

**Technische Universität München, Arcisstraße 21, 80333 München**

<b>02 E 11860E</b>	Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt E	 70
--------------------	--	--

<b>02 E 11870D</b>	Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt D	 84
--------------------	--	--

**Universität des Saarlandes, Campus, 66123 Saarland**

<b>02 E 11860D</b>	Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt D	 68
--------------------	--	--

**Universität Greifswald, Domstr. 11, 17489 Greifswald**

<b>02 E 11870C</b>	Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt C	 82
--------------------	--	--

**Universität Heidelberg, Grabengasse 1, 69117 Heidelberg**

<b>02 E 11860H</b>	Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt H	 76
--------------------	--	--

**Universität Kassel, Mönchebergstr. 19, 34125 Kassel**

<b>02 E 11849J</b>	Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt J	 170
--------------------	--	---

**Universität Potsdam, Am Neuen Palais 10, 14469 Potsdam**

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

