

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

**PTE-E Nr. 66**

BMUV geförderte FuE-Vorhaben zur  
„Endlagerung radioaktiver Abfälle“

Berichtszeitraum: 01. Juli – 31. Dezember 2023

Projektträger Karlsruhe (PTKA)  
Entsorgung

**März 2024**

## 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 – danach BMWK) geförderten FuE-Vorhaben zur Endlagerung radioaktiver Abfälle. Seit Januar 2021 ist das Projektförderprogramm „BMW-Forschungsförderung zur nuklearen Sicherheit - Projektförderprogramm des Bundesministeriums für Wirtschaft und Energie zur Sicherheitsforschung für kerntechnische Anlagen (2021-2025)“ Grundlage der Projektförderung.

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

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

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

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

Der Bericht ist wie folgt gegliedert:

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

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

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

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

---

<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.....	8
D	Forschungsgebiet Querschnittsfragen.....	12
D1	Wissens- und Kompetenzmanagement.....	12
D2	Sozio-technische Fragestellungen.....	13
D3	Kernmaterialüberwachung (Safeguards).....	15
<b>2</b>	<b>Formalisierte Zwischenberichte .....</b>	<b>16</b>
2.2	VORHABEN BEREICH C.....	16
2.3	VORHABEN BEREICH D.....	168
	Information zu Publikationen sowie zu Aus- und Weiterbildung.....	200
<b>3</b>	<b>Verzeichnis der Forschungsstellen.....</b>	<b>201</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>	 32
<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>	 81
<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>	 100
<b>02 E 12052A</b>	Verbundprojekt: Konkurrenz und Reversibilität bei Sorptionsvorgängen (KuRSiv), Teilprojekt A	<b>Helmholtz-Zentrum Dresden - Rossendorf e. V.</b>	 120
<b>02 E 12052B</b>	Verbundprojekt: Konkurrenz und Reversibilität bei Sorptionsvorgängen (KuRSiv), Teilprojekt B	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH</b>	 122
<b>02 E 12052C</b>	Verbundprojekt: Konkurrenz und Reversibilität bei Sorptionsvorgängen (KuRSiv), Teilprojekt C	<b>Karlsruher Institut für Technologie (Großforschungsaufgabe)</b>	 124
<b>02 E 12062A</b>	Verbundprojekt: Spannungsprognosen – Quantifizierung und Reduzierung von Ungewissheiten mit geomechanisch-numerischen Untergrundmodellen (SQuaRe), Teilprojekt A: Ungewissheiten durch Materialparameter, Diskretisierung, Initial- und Randbedingungen	<b>Technische Universität Darmstadt</b>	 126

<b>02 E 12062B</b>	Verbundprojekt: Spannungsprognosen – Quantifizierung und Reduzierung von Ungewissheiten mit geomechanisch-numerischen Untergrundmodellen (SQuaRe), Teilprojekt B: Bayesischer Ansatz zur Kalibrierung geomechanisch- numerischer Modelle mit Reduzierung von Ungewissheiten	<b>Helmholtz-Zentrum Potsdam Deutsches GeoForschungsZentrum GFZ</b>	 128
<b>02 E 12062C</b>	Verbundprojekt: Spannungsprognosen – Quantifizierung und Reduzierung von Ungewissheiten mit geomechanisch-numerischen Untergrundmodellen (SQuaRe), Teilprojekt C: Ungewissheiten durch geometrische Parameter, Erstellung von Ersatzmodellen durch Methoden der künstlichen Intelligenz	<b>Rheinisch-Westfälische Technische Hochschule Aachen</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>	 20
<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>	 22
<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>	 24
<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>	 28
<b>02 E 11819</b>	Mineralumwandlung und Sorption bei erhöhten Temperaturen in geklüfteten Kristallingesteinen und Barrierematerial (MUSE)	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln</b>	 30
<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>	 34
<b>02 E 11870A</b>	Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt A	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln</b>	 53
<b>02 E 11870B</b>	Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt B	<b>Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e. V., Dresden</b>	 55
<b>02 E 11870C</b>	Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt C	<b>Universität Greifswald</b>	 57
<b>02 E 11870D</b>	Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in	<b>TU München</b>	 59

	Bentonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt D		
<b>02 E 11870E</b>	Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt E	<b>Leibniz Universität Hannover</b>	 61
<b>02 E 11870F</b>	Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt F	<b>Leibniz Universität Hannover</b>	 63
<b>02 E 11880</b>	Sicherheitsrelevante Untersuchungen zur Bentonitaufsättigung (SIRUB)	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln</b>	 65
<b>02 E 11900</b>	Langzeitsicherheit von Verschlussystemen in Schächten und Rampen im Vergleich (LARYSSA)	<b>BGE Technology GmbH, Peine</b>	 71
<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	<b>Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e. V., Dresden</b>	 73
<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	<b>Friedrich-Schiller-Universität Jena</b>	 75
<b>02 E 11921A</b>	Verbundprojekt: Untersuchungen zur SEPARation von AMericiem aus hochradioaktiven Abfalllösungen (SEPAM), Teilprojekt A	<b>Forschungszentrum Jülich GmbH</b>	 77
<b>02 E 11921B</b>	Verbundprojekt: Untersuchungen zur SEPARation von AMericiem aus hochradioaktiven Abfalllösungen (SEPAM), Teilprojekt B	<b>Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Eggenstein-Leopoldshafen</b>	 79
<b>02 E 11961</b>	Entwicklung eines salzgrusbasierten	<b>Technische Universität Bergakademie Freiberg</b>	 87

	Versatzkonzepts unter der Option Rückholbarkeit - Phase 1 (SAVER)		
<b>02 E 11971A</b>	Verbundprojekt: Anwendbarkeit von Niedertemperatur-Salzschmelzen für Verschlussmaßnahmen von Endlagern für radioaktiver Abfälle im Wirtsgestein Salz (SalVE), Teilprojekt A	<b>Technische Universität Bergakademie Freiberg</b>	 89
<b>02 E 11971B</b>	Verbundprojekt: Anwendbarkeit von Niedertemperatur-Salzschmelzen für Verschlussmaßnahmen von Endlagern für radioaktiver Abfälle im Wirtsgestein Salz (SalVE), Teilprojekt B	<b>BGE Technology GmbH, Peine</b>	 91
<b>02 E 12001A</b>	Verbundprojekt: Sandwich Support Projekt 1: Heterogene Bentonithydratation (SANDWICH-SP1), Teilprojekt A	<b>Karlsruher Institut für Technologie (KIT)</b>	 102
<b>02 E 12001B</b>	Verbundprojekt: Sandwich Support Projekt 1: Heterogene Bentonithydratation (SANDWICH-SP1), Teilprojekt B	<b>Ruhr-Universität Bochum</b>	 104
<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	<b>Technische Universität Bergakademie Freiberg</b>	 132
<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	<b>Helmholtz-Zentrum Dresden - Rossendorf e. V</b>	 134
<b>02 E 12092</b>	Recherche und Beschreibung für das Endlagerbehältersystem in Frage kommende Materialien (ElaBeMa)	<b>Leibniz Universität Hannover</b>	 138
<b>02 E 12102</b>	Entwicklung einer selbstlernenden Modellierungsmethodik zu geomechanischen und	<b>Technische Universität Carolo-Wilhelmina zu Braunschweig</b>	 140

	geotechnischen Prozessen am Beispiel der Planungs- und Auffahrungsphase einer Einlagerungsstrecke eines Tiefenlagers (SEMOTI)		
<b>02 E 12122A</b>	Verbundprojekt: Stabilität von Mineralphasen des Eisens im Nahfeld eines Endlagers (STAMINA), Teilprojekt A	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH</b>	 146
<b>02 E 12122B</b>	Verbundprojekt: Stabilität von Mineralphasen des Eisens im Nahfeld eines Endlagers (STAMINA), Teilprojekt B	<b>Karlsruher Institut für Technologie (Großforschungsaufgabe)</b>	 148
<b>02 E 12133A</b>	Verbundprojekt: Weiterführung der Entwicklung von Ausbau von Grubenbauen für ein HAW-Endlager in Tongestein (AGEnT002), Teilprojekt A	<b>BGE TECHNOLOGY GmbH</b>	 150
<b>02 E 12133B</b>	Verbundprojekt: Weiterführung der Entwicklung von Ausbau von Grubenbauen für ein HAW-Endlager in Tongestein (AGEnT002), Teilprojekt B	<b>DMT GmbH &amp; Co. KG</b>	 152
<b>02 E 12153A</b>	Verbundprojekt: Erosion von Bentonit unter In-situ Bedingungen durch Einwirkung natürlicher Wässer in geologischen Tiefenlagern (EVIDENT), Teilprojekt A	<b>Friedrich-Schiller-Universität Jena</b>	 154
<b>02 E 12153B</b>	Verbundprojekt: Erosion von Bentonit unter In-situ Bedingungen durch Einwirkung natürlicher Wässer in geologischen Tiefenlagern (EVIDENT), Teilprojekt B	<b>Karlsruher Institut für Technologie (Großforschungsaufgabe)</b>	 156
<b>02 E 12153C</b>	Verbundprojekt: Erosion von Bentonit unter In-situ Bedingungen durch Einwirkung natürlicher Wässer in geologischen Tiefenlagern (EVIDENT), Teilprojekt C	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH</b>	 158
<b>02 E 12163A</b>	Verbundprojekt: Vertikales hydraulisches Dichtsystem nach dem Sandwich-Prinzip - Hauptprojekt Phase 2 (Sandwich-HP2), Teilprojekt A	<b>Karlsruher Institut für Technologie (Universitätsaufgabe)</b>	 160

<b>02 E 12163B</b>	Verbundprojekt: Vertikales hydraulisches Dichtsystem nach dem Sandwich-Prinzip - Hauptprojekt Phase 2 (Sandwich-HP2), Teilprojekt B	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH</b>	 162
<b>02 E 12163C</b>	Verbundprojekt: Vertikales hydraulisches Dichtsystem nach dem Sandwich-Prinzip - Hauptprojekt Phase 2 (Sandwich-HP2), Teilprojekt C	<b>Technische Universität Bergakademie Freiberg</b>	 164
<b>02 E 12173</b>	Entwicklung eines salzgrusbasierten Versatzkonzepts unter der Option Rückholbarkeit - Phase 2 (SAVER II)	<b>Technische Universität Bergakademie Freiberg</b>	 166

### C3 Sicherheitsnachweis

<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>	 17
<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>	 26
<b>02 E 11860A</b>	Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt A	<b>Johannes Gutenberg-Universität Mainz</b>	 36
<b>02 E 11860B</b>	Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt B	<b>Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e. V.</b>	 38
<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>	 40
<b>02 E 11860D</b>	Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt D	<b>Universität des Saarlandes</b>	 42
<b>02 E 11860E</b>	Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt E	<b>TU München</b>	 44
<b>02 E 11860F</b>	Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt F	<b>Universität Potsdam</b>	 46
<b>02 E 11860G</b>	Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt G	<b>TU Dresden</b>	 48

<b>02 E 11860H</b>	Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt H	<b>Universität Heidelberg</b>	 51
<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>	 67
<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>	 69
<b>02 E 11941</b>	Wissenschaftliche Grundlagen zum Nachweis der Langzeitsicherheit von Endlagern (WiGru-9)	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH</b>	 84
<b>02 E 11981A</b>	Verbundprojekt: Implementierung eines Monitoringsystems zur Evaluierung der Korrosionsvorgänge an Behältermaterialien in Bentonit-basierten Endlagerkonzepten (IMKORB), Teilprojekt A	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln</b>	 93
<b>02 E 11981B</b>	Verbundprojekt: Implementierung eines Monitoringsystems 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>	 96
<b>02 E 11981C</b>	Verbundprojekt: Implementierung eines Monitoringsystems zur Evaluierung der Korrosionsvorgänge an Behältermaterialien in Bentonit-basierten Endlagerkonzepten (IMKORB), Teilprojekt C	<b>Leibniz Universität Hannover</b>	 98
<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>	 106

<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>	 108
<b>02 E 12022A</b>	Verbundprojekt: Internationales Benchmarking zur Verifizierung und Validierung von TH <sup>2</sup> M-Simulatoren insbesondere im Hinblick auf fluiddynamische Prozesse in Endlagersystemen - Erweiterung auf multiphysikalische Ansätze und mehrdimensionale Modellgeometrien (BenVaSim II), Teilprojekt A	<b>Technische Universität Clausthal</b>	 110
<b>02 E 12022B</b>	Verbundprojekt: Internationales Benchmarking zur Verifizierung und Validierung von TH <sup>2</sup> M-Simulatoren insbesondere im Hinblick auf fluiddynamische Prozesse in Endlagersystemen - Erweiterung auf multiphysikalische Ansätze und mehrdimensionale Modellgeometrien (BenVaSim II), Teilprojekt B	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH</b>	 112
<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>	 114
<b>02 E 12042A</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 Einschusses unter Berücksichtigung von Optimierungsmaßnahmen (CHRISTA III), Teilpr. A	<b>BGE TECHNOLOGY GmbH</b>	 116
<b>02 E 12042B</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 Einschusses unter Berücksichtigung von Optimierungsmaßnahmen (CHRISTA III), Teilpr. B	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH</b>	 118

<b>02 E 12082</b>	Langzeitsicheres Abdichtungselement aus Salzschnittblöcken - Durchführung, Auswertung und Reanalyse von THM-Versuchen unter triaxialer Extensionsbeanspruchung (SSBVIER)	<b>Technische Universität Clausthal</b>	 136
<b>02 E 12112A</b>	Verbundprojekt: Systematic sensitivity analysis for mechanistic geochemical models using field data from crystalline rock (SANGUR), Teilprojekt A	<b>Helmholtz-Zentrum Dresden - Rossendorf e. V.</b>	 142
<b>02 E 12112B</b>	Verbundprojekt: Systematic sensitivity analysis for mechanistic geochemical models using field data from crystalline rock (SANGUR), Teilprojekt B	<b>Technische Universität Clausthal</b>	 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>	 169
<b>02 E 11849B</b>	Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt B	<b>Christian-Albrechts-Universität zu Kiel</b>	 173
<b>02 E 11849C</b>	Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt C	<b>Freie Universität Berlin</b>	 175
<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>	 177
<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>	 179
<b>02 E 11849F</b>	Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt F	<b>Leibniz Universität Hannover</b>	 183
<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>	 186
<b>02 E 11849H</b>	Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt H	<b>TU Berlin</b>	 188
<b>02 E 11849I</b>	Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt I	<b>TU Carolo-Wilhelmina zu Braunschweig</b>	 191

<b>02 E 11849J</b>	Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt J	<b>Universität Kassel</b>	 193

**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>	 195
<b>02 W 6281</b>	Antineutrino-Detektion zur Überwachung radioaktiver Abfälle (NU-SAFEGUARDS)	<b>Rheinisch-Westfälische Technische Hochschule Aachen</b>	 197

## **2 Formalisierte Zwischenberichte**

### **2.1 Vorhaben Bereich C1 – C3**

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11466</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> RepoTREND+: Entwicklung von Rechenmodulen für die integrierte Modellierung von Transportprozessen im einschlusswirksamen Gebirgsbereich		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> C3: Sicherheitsnachweis; C3.1 Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-)Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung ; C3.3 Werkzeuge der Sicherheitsanalysen		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.04.2016 bis 31.07.2024	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2023 bis 31.12.2023	
<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*

Die Projektzeit von RepoTREND+ endet im Jahr 2024. Eine zentrale Zielsetzung besteht darin, die Entwicklung des Nahfeldmoduls NaTREND fortzusetzen. Dies soll im Rahmen eines neuen Projekts realisiert werden. In der aktuellen Projektphase wurden umfassende Anforderungen erfasst, priorisiert und spezifiziert, die in der kommenden Phase implementiert werden sollen. Das Hauptaugenmerk liegt dabei auf der Erweiterung der Einsatzfähigkeit des RepoTREND-Nahfeldrechenmoduls NaTREND. Die identifizierten Anforderungen, die in diesem Zusammenhang adressiert werden sollen, sind:

1. Gebirgskonvergenz
2. Korrosion von Metallen und Zement
3. Erweiterung des Statistikmoduls um neue Methoden zur statistischen Analyse
4. Optimierung der numerischen Algorithmen mit besonderem Fokus auf Stabilität und Rechenleistungsverbesserungen

Die detaillierte Projektskizze, die diese Entwicklungen umfasst, wurde erfolgreich bei der PK-ELF vorgestellt und erhielt die Bewertung "A". Dies bedeutet, dass die geplanten Arbeiten zur Weiterentwicklung des Nahfeldmoduls NaTREND sowie des Statistikrahmens RepoSTAR im Rahmen eines Nachfolgeprojekts fortgesetzt werden sollen.

#### *Arbeitspaket 4*

Zum Validieren von NaTREND soll ein konzeptuell einfaches und möglichst gut kontrollierbares Experiment im geotechnischen Labor durchgeführt werden. Hierbei wurde eine Versuchszelle aus Plexiglas mit den Abmessungen 200 mm x 200 mm x 1 mm geschaffen, um die Wasserausbreitung zu beobachten. Die zuvor aufgetretenen Probleme mit der Abdichtung konnten erfolgreich gelöst werden.

Vorversuche ermöglichten die Überwachung der Versuchszelle von beiden Seiten durch Kameras, und der Ausbreitungsvorgang wurde als Film ausgewertet. Die Analyse der aufgenommenen Einzelbilder bestätigte größtenteils ein 2-dimensionales Ausbreitungsverhalten in der Zellenebene. Dennoch wurden Randeffekte an den Plexiglaswänden identifiziert, die noch behoben werden müssen, um die Genauigkeit der Experimente zu gewährleisten.

Testrechnungen zum Radionuklidtransport wurden entwickelt und durchgeführt. Die bestehende Bibliothek von automatischen Testfällen wurde entsprechend der aktuellen Entwicklung angepasst und um neue Testfälle erweitert, um die Zuverlässigkeit der Software sicherzustellen.

In der aktuellen Projektphase wurde ein wichtiger Meilenstein erreicht, da das Nahfeldmodul nun in der ersten Basisversion einsatzfähig vorliegt, wie im ursprünglichen Projektplan geplant. Dies markiert einen sinnvollen Zeitpunkt, die durchgeführten Arbeiten umfassend zu dokumentieren. Besonders relevant sind dabei die zugrunde liegenden, komplexen Konzepte, die im Rahmen des Abschlussberichts festgehalten werden sollen. Die bisher verfassten Kapitel umfassen die theoretischen Grundlagen der Abläufe in ungesättigten

Medien, das physikalische Modell und das mathematische Modell. Die Arbeiten am Abschlussbericht sollen im nächsten Halbjahr fortgesetzt werden.

#### *Arbeitspaket 6*

Der vorliegende Bericht wurde erstellt.

#### **4. Geplante weitere Arbeiten**

Im nächsten Halbjahr soll überwiegend an AP4 gearbeitet werden, wobei der Schwerpunkt bei dem Testen, bei der Durchführung des geplanten Laborversuchs und beim Verfassen des umfassenden Abschlussberichts 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> C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte; Endlagertechnik und (geo-)technische Barrieren; C2.3 Geotechnische und technische Barrieren; C2.4 Monitoring; C3: Sicherheitsnachweis; C3.1 Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-) Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung;		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.06.2017 bis 31.05.2023	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2023 bis 31.12.2023	
<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 Klufft- und Störungszonennetzwerkes präzisiert.

### 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

- AP 1: Bemessung des geotechnischen Verschlussystems
- AP 2: Gesteinseignungsklassifikationen als Positionierungskriterien für Dichtelemente, Bohrlöcher und Auffahrungen im Kristallin
- AP 3: Charakterisierung eines Klufft- 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

Im Berichtszeitraum wurde intensiv an der Dokumentation der arbeitspaketspezifischen Ergebnisse gearbeitet, welche in Form eines umfassenden Abschlussberichtes festgehalten werden. Darüber hinaus lag der Schwerpunkt verstärkt auf der Fertigstellung der Modellierungen in AP5, die sich mit Strömungs- und Transportberechnungen beschäftigen. In AP5 werden mehrere Modellierungsansätze, die für die Simulation von Strömungs- und Transportprozessen in geklüfteten Medien verwendet werden können, miteinander verglichen. Der Vergleich wird über Benchmarkmodellierungen hergestellt, um Vor- und Nachteile der Modellierungsansätze zu beleuchten. Die Berechnungsfälle unterscheiden sich in der Anzahl der zu berücksichtigenden Klüfte und den zu simulierenden physikalischen Prozessen. Fluidströmung und sich anschließende Transportberechnungen werden zunächst in einer Einzelkluft analysiert und dann auf ein Modell mit vier Klüften, die sich schneiden, erweitert. Um einen größeren Bezug zur Realität herzustellen, wird ein stochastisch erzeugtes DFN (discrete fracture network) mit Klüften unterschiedlicher Größen, Ausrichtungen und Verbindungen im abschließenden Modell verwendet. Exemplarisch sollen an dieser Stelle wesentliche Erkenntnisse aus den Transportberechnungen zusammengefasst werden. Insgesamt zeigt der DFN-Ansatz im Betrachtungsmaßstab einer Einzelkluft eine sehr gute Übereinstimmung von numerischer gegenüber analytischer Lösung. Während im FC-Ansatz die Konzentrationen tendenziell überschätzt werden, werden diese im Oda-Ansatz gegenüber der analytischen Lösung unterschätzt. Der DFN-Ansatz erlaubt eine bessere geometrische Abbildung der Einzelkluft, was sich in einer genaueren Abbildung der Transportprozesse widerspiegelt. Die Übertragung auf ein regelmäßiges äquidistantes Kontinuumsgrid führt im FC- und Oda-Ansatz zu geometrischen Abweichungen (Treppmuster), die die Strömungsgeschwindigkeiten und den effektiven Querschnitt der Fließpfade lokal verzerren. Die sich daraus ergebenden lokalen Unterschiede in den Strömungsgeschwindigkeiten entlang der Einzelkluft haben letztendlich auch einen Einfluss auf die Ergebnisse der Transportberechnungen.

Im Beobachtungsmaßstab des Kluftsystems und bei Auswertung von Konzentrationsprofilen entlang des Modells fällt zudem auf, dass die Übertragung auf ein Kontinuumsgrid in Kombination mit der gewählten Zonengröße im Berechnungsgrid beim FC-Ansatz zu zusätzlichen Verbindungen zwischen Klüften führt, die im DFN-Ansatz und damit ursprünglichen geometrischen Modell nicht vorhanden sind. Daraus ergeben sich lokal neue Transportpfade im FC-Ansatz, die in den Konzentrationsprofilen sichtbar machen und zu deutlichen Unterschieden führen. Beim FC-Ansatz muss folglich eine passende Zonengröße gewählt werden, um das ursprüngliche Transportverhalten nicht durch zusätzliche Verbindungen zwischen den Klüften zu verfälschen.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

AP6: Dokumentation der arbeitspaketspezifischen Ergebnisse und Anfertigung des Abschlussberichtes

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Müller et al. (2023): Challenges and Best Practices for Modelling Fractures in Geological Repositories. 2nd International Research Symposium of BASE on Safety of Nuclear Disposal (SafeND), Berlin, 13-15 September, 2023. POSTER

<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; C3.1: Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-)Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung, Punkt 1, 2; C3.3: Werkzeuge der Sicherheitsanalysen, Punkt 2		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.06.2017 bis 29.02.2024	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2023 bis 31.12.2023	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 2.061.288,00 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>3f++</sup> 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 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

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 13.07.2023, 25.08.2023, 25.09.2023, 06.10.2023, 19.10.2023, 10.11.2023, 05.12.2023 und 20.12.2024 Arbeitstreffen der Verbundpartner per Videokonferenz, v. a. zur Diskussion der Ergebnisse aus AP3 und AP5, durchgeführt.

AP 4: Nach Auswertung des Vorversuchs zum Einfluss der Reduktionsmittel auf die Freisetzung von Lanthanoiden sowie von Radionuklidanaloga Se, Ni, Sr, Cs, Ba, Th und U wurde der Auslaugungsversuch mit zwei kalzitischen Kluftmineralisationen und zwei angrenzenden Alterationszonen (im Migmatit) aus dem UTL Bukov ohne Einsatz eines Reduktionsmittels mit 0,01 M NaCl für die Reaktionszeiten von 1, 4, 7, 14, 21, 28, 35, 42, 49 und 56 Tagen durchgeführt. Zur Ermittlung des potenziell verfügbaren und des Gesamtinventars an untersuchten Spurenelementen wurden zudem die Extraktionen mit 0,1 M und 6 M HCl sowie ein Totalaufschluss der Proben vorgenommen. Die Messungen des anorganischen und des Gesamtkohlenstoffes der Überstandslösungen aus dem Auslaugungsversuch, die ICP-OES-Analysen der Hauptelemente K, Na, Mg, Ca, S und Si sowie die ICP-MS-Analysen der untersuchten Spurenelemente aus dem Auslaugungsversuch und dem Totalaufschluss wurden abgeschlossen. Die verbleibenden ICP-OES- und ICP-MS-Analysen der Extraktionen mit 0,1 M und 6 M HCl und die Auswertungen der Ergebnisse werden Anfang 2024 durchgeführt.

AP 5: Im Rechenfall 6 wurde ein Würfelmodell mit 43 stochastisch erzeugten Klüften erstellt. Analog zu den Rechenfällen 4 und 5 wurden die Berechnungen des Transports und der Strömung sowohl mit dem DFN- als auch mit dem FC-Ansatz von  $d^{3f++}$  durchgeführt. Zusätzlich wurden Berechnungen basierend auf dem ODA-Ansatz durchgeführt. Zur Untersuchung der Gittereffekte beim ODA-Ansatz wurden drei Gitter mit unterschiedlichen Elementgrößen von jeweils 10 m, 20 m und 40 m berücksichtigt. Im Gegensatz zu den Rechenfällen 4 und 5 kann eine analytische Lösung zur Rechenfall 6 nicht herangezogen werden. Daher erfolgte die Modellvalidierung durch den Vergleich der Berechnungen von  $d^{3f++}$  mit denen, die von BGETec mit OGS durchgeführt wurden. Für den Vergleich der Ergebnisse wurden fünf Linien ausgewählt, wobei vier Linien auf Klüften in verschiedenen Orientierungen liegen und eine Linie im Zentrum entlang der Fließrichtung verläuft. Die Berechnungen aller drei Ansätze lieferten Konzentrationsprofile mit ähnlichen Tendenzen entlang der verschiedenen Linien. Es stellte sich heraus, dass die Übertragung der Klüfte auf ein Kontinuumsgitter zusätzliche Verbindungen zwischen den Klüften erzeugt. Daher ergeben sich die Berechnungen mit der FC-Ansatz eine Überschätzung der Konzentrationsverteilung. Allerdings zeigen die Berechnungen von  $d^{3f++}$  eine gute Übereinstimmung mit den Ergebnissen von OGS sowohl im FC- als auch im DFN-Modell. Bei der Berechnung mit dem ODA-Ansatz ergeben sich deutliche Unterschiede in den Ergebnissen bei verschiedenen Gittergrößen, was die wichtige Rolle der Gittereffekte auf den ODA-Ansatz bestätigt.

AP6: Der Abschlussbericht wird erstellt.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

AP 4: Abschluss der Analytik und Auswertung der Ergebnisse

AP 5: Finalisierung der Auswertung und Diskussion der Ergebnisse der Benchmarkberechnungen und Dokumentation

AP 6: Dokumentation der Ergebnisse im Abschlussbericht

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Müller et al. (2023): Challenges and Best Practices for Modelling Fractures in Geological Repositories. 2nd International Research Symposium of BASE on Safety of Nuclear Disposal (SafeND), Berlin, 13-15 September, 2023. POSTER

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11627</b>	
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Arteigene Versatz- und Verschlussmaterialien für die Endlagerung hochradioaktiver Abfälle in Tonformationen (AVET)			
<b>Zuordnung zum FuE-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> 01.01.2023 bis 30.06.2023	
<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**

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

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

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

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

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

- Erstellung des Abschlussberichts EURAD-WP6-GAS

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

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> 02 E 11668A	
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Smart-Kd in der Langzeitsicherheitsanalyse - Anwendungen (SMILE), Teilprojekt A			
<b>Zuordnung zum FuE-Förderprogramm:</b> C3: Sicherheitsnachweis; 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> 01.07.2023 bis 31.12.2023	
<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: Fertigstellung des Aluminium-Testfalles. Debugging des Smart  $K_d$ -Moduls, Einkreisen des Fehlers und Arbeiten an einer Lösung des Problems. Konzeptuelle Arbeiten.
- AP3: Veröffentlichung der Arbeiten zu Batch- und Säulenexperimente, Oberflächenkomplexmodellierung sowie des reaktiven Stofftransports in Systemen mit Ni, Quarz und K-Feldspat im Rahmen einer Dissertation.
- 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

- AP5: Abschluss und Dokumentation der großräumigen Strömungs- und Transportrechnungen unter Anwendung des neuen Konzepts.
- AP6: Fertigstellung des Projektabschlussberichts.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Julian Fricke: Surface Complexation and reactive transport modeling: Batch sorption and column experiments of Ni with quartz, K-feldspar, and muscovite. Dissertation, Technische Universität Carola-Wilhelmina, Braunschweig, 11.10. 2023

<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> 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“			
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.09.2018 bis 31.05.2024		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2023 bis 31.12.2023	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 2.558.457,16 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  
 AP 11: MAGIC

### 3. Durchgeführte Arbeiten

#### AP 1 – Bereitstellung von Material und Methoden

Der von der GRS in Zusammenarbeit mit dem Arbeitskreis Betonkorrosion (AKB) vorbereitete Workshop „Zementbasierte Verschlussbauwerke im Salinar“ wurde erfolgreich durchgeführt, der Tagungsband hierzu wird im 1.HJ 2024 fertiggestellt werden.

#### AP 2 – HC-Versuche

Die im AP 2 vorgesehenen Versuche wurden bereits erfolgreich abgeschlossen.

**AP 3 – HMC-Versuche**

Die im AP 3 vorgesehenen Versuche wurden bereits erfolgreich abgeschlossen.

**AP 4 – THC-Versuche**

Die im AP 4 vorgesehenen Versuche wurden bereits erfolgreich abgeschlossen.

**AP 5 – TM-Versuche**

Die im AP 5 vorgesehenen Versuche wurden bereits erfolgreich abgeschlossen.

**AP 6 – THMC-Versuche**

Zurzeit befindet sich noch eine kombinierte A1-Probe in einem der beiden Versuchsstände. Nach Erhalt der US-Proben wird diese ausgebaut und durch eine kombinierte US-Probe ersetzt.

**AP 7 – Modelltheoretische Untersuchungen**

Die Modellrechnungen haben bereits begonnen und werden im 1. HJ 2024 abgeschlossen sein. Z.Z. erfolgt die Abstimmung zur Zusammensetzung der Baustoffe sowie die Zusammenstellung der Datenbasis aus THEREDA. Die aktualisierte THEREDA-Datenbasis wird Anfang 2024 zur Verfügung stehen.

**AP 8 – Dokumentation**

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

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

SNL hat im zweiten HJ 2023 kombinierte Probekörper hergestellt und wird diese der GRS Anfang 2024 zur Verfügung stellen. Erste hydraulisch-mechanische Untersuchungen zum verwendeten US-Sorelbeton wurden bereits durchgeführt.

**AP 10 – Langzeitkorrosionsversuche**

Im Oktober 2023 wurde die letzte Kaskade der Langzeitkorrosionsversuche beendet, so dass diese Versuchsreihe nun abgeschlossen ist.

Alle Proben der HC/THC-Versuche wurden in eine definierte Langzeitlagerung überführt, damit sie in einem späteren Projekt Verwendung finden können.

**AP 11 – MAGIC**

Im 3. Quartal wurde ein Versuch an niedrig-pH Beton zur Untersuchung der mechanischen Festigkeit in Abhängigkeit von Temperatur- und Lösungseinfluss gestartet. Nachdem der Versuch zunächst planmäßig verlief, versagte im 4. Quartal die eingesetzte Messkette, sodass dieser Versuch frühzeitig beendet werden musste. Die weiteren geplanten Versuche an 5 Prüfkörpern in einem zweiten Versuchsstand befinden sich nach wie vor in Vorbereitung. Hierfür musste eine Sonderanfertigung von Messketten erfolgen. Die Messketten wurden in 12/2023 geliefert und werden derzeit kalibriert.

**4. Geplante Weiterarbeiten**

Mit der Untersuchung der US-Proben wird nach deren Erhalt begonnen. Die Modellrechnungen werden im 1. HJ 2024 durchgeführt.

**5. Berichte, Veröffentlichungen**

-

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> 02 E 11819
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Mineralumwandlung und Sorption bei erhöhten Temperaturen in geklüfteten Kristallingesteinen und Barrierematerial (MUSE)		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> C1.3 Methodische Grundlagen eines Standortvergleichs; C2.3 Geotechnische und technische Barrieren, Punkt 2, 4; 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> 01.07.2023 bis 31.12.2023	
<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 Kristallinstandorte durch Erhebung einer Bandbreite von Sorptionsdaten im Kristallingestein getestet werden, (ii) eine Methode zur Untersuchung des Einflusses von erhöhten Temperaturen auf Mineralumwandlungen und Gasfreisetzung in Kluffüllungen entwickelt werden und (iii) Mechanismen der Bentonitumwandlung und Gasfreisetzung untersucht werden.

### 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

Bei der Durchführung des Vorhabens werden folgende Arbeitspakete bearbeitet:

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

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

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

AP 4: Dokumentation und Projektleitung

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

AP 1: Übertragbarkeit der normierten Verteilungskoeffizienten:

Die ICP-MS-Messungen der Totalaufschlüsse mit der Tetrafluoroborsäure ( $\text{HBF}_4$ ) wurden für alle 10 Proben abgeschlossen und ausgewertet. Die BET-Messungen wurden fortgeführt.

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

Keine Arbeiten durchgeführt.

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

Die Analysen der Gasproben aus der letzten Versuchsreihe wurden abgeschlossen.

AP 4: Dokumentation und Projektleitung:

Keine Arbeiten durchgeführt.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

AP 1: Abschluss und Auswertung der BET-Messungen.

AP 2: Keine weiteren Arbeiten.

AP 3: Keine weiteren Arbeiten.

AP 4: Keine weiteren Arbeiten.

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

- keine -

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> 02 E 11829	
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Tonforschung im Felslabor Mont Terri ab Phase 25 (MonTe-25)			
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Im Projektförderprogramm des BMUV – Forschungsförderung zur nuklearen Sicherheit (2021-2025) – ist das Vorhaben dem FuE-Bereich C2 „Sicherheits- und Endlagerkonzepte; Endlagertechnik und (geo-)technische Barrieren“, FuE-Feld C2.3 „Geotechnische und technische Barrieren“, FuE-Thema „Untersuchungen zu Material und an Komponenten von Barriersystemen, einschließlich zu Prozessen der Radionuklidrückhaltung durch geotechnische Barrieren (Schnittstelle zu FuE-Feld C3.1)“ sowie dem FuE-Feld C3.1 „Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-)Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung“, FuE Thema „Weiterentwicklung des Verständnisses zu den im Endlagersystem und der Biosphäre ablaufenden thermischen, hydraulischen, mechanischen, chemischen und biologischen (THMCb-)Prozessen und ihrer Kopplung“ zuzuordnen.			
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.07.2019 bis 31.12.2024		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2023 bis 31.12.2023	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 2.075.840,00 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
- AP4/5/6: Keine Fortführung der Arbeiten
- AP7: Weiterentwicklung von VIRTUS für den Einsatz im Tonstein
- AP8: Mine-By Experiment (MB-A) in der sandigen Fazies (mit BGR und Swisstopo)
- AP9: CD-A Experiment in der sandigen Fazies (Konsortialführer BGR)
- AP10: Technical und Steering Meetings

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

**AP1:** Die GRS hat sich an der zum Ende des Jahres auslaufenden Phase des internationalen Projekts DECOVALEX an der Modellierung des FE-Experiments beteiligt. Die Modellierung wurde mit dem FEM code CODE\_BRIGHT durchgeführt. Im Berichtszeitraum wurde das THM-gekoppelte 3D Model bearbeitet. Die Einbindung einer Spritzbetonschicht führte zu numerischen Problemen durch die geringe Mächtigkeit des Betons und der daraus erforderlich hohen Auflösung des Netzes. In der finalen Modellierung wurde der Spritzbeton vernachlässigt und nur die Ventilation eingebunden. Hierdurch konnte eine sehr gute Abbildung der Porendrücke im Opalinuston erzielt werden.

**AP2:** Von den Experimentpartnern wurde im 1. Hj. ein spezielles Probeentnahmeschema entwickelt, dass dafür ausgelegt sein sollte bei laufendem Betrieb des Erhitzers, repräsentative Proben gewinnen zu können und dabei keine Veränderungen der Porenstruktur/Dichte sowie der Fluidverteilung/(Teil-)sättigung zu verursachen. Die Bohrarbeiten konnten dann in der zweiten Jahreshälfte im September beginnen und dauerten bis Ende November. Das vorab ringförmig injizierte Kunstharz sollte das lose Bentonitmaterial im Inneren fixieren. Ein erster Prototyp der speziell für die Kernentnahme von teilgesättigten Verschlussbaustoffen entwickelte Entnahmetechnik wurde auf dem TM-40 gezeigt. Eine dem Einbauzustand entsprechende Probe im Nahbereich des Erhitzers konnte mit dieser Technik nicht gewonnen werden. Bei der zweiten Bohrung wurde auf die Technik mit der Harzinjektion verzichtet und stattdessen Fiber-Glasrohre zur Aufnahme des teilgesättigten Bentonitmaterials verwendet, was zu einem erheblich besseren Kerngewinn geführt hat. Aufgrund der zusätzlich entstandenen Kosten für die 2. Bohrungen wurde von den Partnern entschieden, dass zunächst keine weitere Bohrung im Bereich des Abschnitts mit dem Sand/Bentonit Gemisch stattfinden wird.

**AP3:** Die Messungen wurden fortgeführt, die Messwerte zeigen eine deutliche Reaktion auf die Streckenerweiterung durch Zunahme der Porendrücke und Temperaturwerte. Nach einem Datenverlust in den Jahren 2020/21 zeigen die Daten seit 2022 eine nahezu konstante Abnahme des Bohrlochdurchmessers. Auch der zeitliche Verlauf des Porenwasserdrucks deutet auf eine Beruhigungsphase der Porendruckverhältnisse im Umgebungsbereich der Piezometersensoren hin. Eine Interpretation der von der GRS erhobenen Messdaten im Hinblick auf die Ableitung von langfristigen Gebirgsdeformationen (als Ziel des Experiments), die nicht durch zusätzliche Hohlraumaufräumungen überlagert werden, erscheint derzeit ohne die Einbeziehung weiterer Messdaten im Umfeld des DM-A Experiments unrealistisch. Daher wurde der Kontakt zum RI-Experiment (Response Investigation, PI Nagra) hergestellt. In der 2. Jahreshälfte haben die Partner Nagra, BGR, Andra, Swisstopo und GRS bei einem Online-Meeting ihre gemeinsame Modellierungsstrategie festgelegt. So sollen neben weiteren Masterstudien auch Modellierungsarbeiten zum HM-gekoppelten Materialverhalten aufgearbeitet werden, immer im Hinblick auf den Abstand zur Ortsbrust der Galerie 2018.

**AP9:** Im CD-A Experiment wurden inzwischen 12 Minipiezometer instrumentiert: vier neben der geschlossenen und vier neben der offenen Niche und je zwei unterhalb der beiden Nischen. Ein weiterer Einfluss auf den Porendruck neben dem Unterschied der Nischenbewetterung stellt der Ausbau nahe den Nischen dar. Die Porendruckmessungen der Minipiezometer zeigen einen unterschiedlichen Verlauf zwischen der offenen und geschlossenen Niche, auf die sich auch der unterschiedliche Ausbau der Galerie neben den beiden Nischen auswirkt. Die Ergebnisse der Porendrucksensoren, die unterhalb der Nischen platziert wurden, zeigen eine Saugspannung, sodass hier mit der derzeitigen Messmethodik keine verwertbaren Ergebnisse ermittelt werden können. Eine Instrumentierung je 2 weiterer Minipiezometer in die Ortsbrust der offenen bzw. der geschlossenen Niche im 2. Hj. 2023, wie zunächst vorgesehen, war aufgrund einer kurzfristigen Verschiebung der Probennahme für das Vorhaben MAGNUS (FKZ 02E12032) nicht umsetzbar. Die Instrumentierung soll im 1. Hj. 2024 stattfinden.

**AP10:** Teilnahme an den Steering Meetings 2. Hj. 2023

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Weiterführung der Messungen in den laufenden Experimenten
- Durchführung begleitender Modellierungen zu den laufenden Experimenten
- Teilnahme an dem Technical Meeting im Mai und den Steering Meetings im 1. Hj.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

<b>Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer:</b> BGE TECHNOLOGY GmbH		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11839</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Entwicklung eines Leitfadens zur Auslegung und zum Nachweis von geotechnischen Barrieren für ein HAW Endlager in Salzformationen (RANGERS)		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> FuE-Feld 3.3 Geotechnische Barriere		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2019 bis 31.12.2023	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2023 bis 31.12.2023	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 519.774,27 EUR	<b>Projektleiter:</b> Eric Simo	

### 1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

### 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

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

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

AP 4: Im Berichtszeitraum wurde der methodologische Ansatz entsprechend der Vorgabe der EndlSiAnfV weiter verfeinert. Laut EndlSiAnfV §5 (1) ist die Integrität des ewGs für die zu erwartenden Entwicklungen im Bewertungszeitraum zu prüfen, darzustellen und seine Robustheit zu begründen. Daraus basierend wurde angelehnt an die VSG eine Differenzierung zwischen dem Integritätsnachweis und der Integritätsprüfung vorgenommen. Mit dem Integritätsnachweis wird die Integritätsbeurteilung für das Referenzszenario durchgeführt. In der Integritätsprüfung werden die alternativen Szenarien relevant für die geotechnischen Barrieren behandelt, vgl. EndlSiAnfV §3 (2).

Der Integritätsnachweis basiert auf Teilnachweisen angelehnt an die Nachweismethode für geotechnische Barrieren nach Müller-Hoeppe et al. (2012). Diese Teilnachweise wurden für den Schachtverschluss, die Langzeitdichtung aus Salzgrus und für die Streckenverschlüsse bei BGE TEC durchgeführt. Der Projektpartner SANDIA steuerte den Teilnachweis der geochemischen Stabilität zu. Zusätzlich werden die Integritätsprüfung bei SANDIA für das gewählte Endlagersystem und die identifizierten abweichenden Szenarien durchgeführt.

Im jetzigen Stand der Bearbeitung zeigen die Nachweisberechnungen bei BGE TEC, dass die Schachtintegrität 500 Jahre nach Einlagerung erhalten bleibt. Dies gilt insbesondere für die Materialien im Schacht, die keine Schädigung erleiden. Zudem zeigt die Auswertung des Zustands der Kontaktzone mithilfe des Dilatanzkriteriums eine Verbesserung über die Zeit. Die Berechnung zur Salzgruskompaktion zeigen eine rasche Kompaktion in den versetzten Bereichen. 30 Jahre nach Verfüllung ist die Kompaktion in den Einlagerungstrecken aufgrund der hohen Temperaturen abgeschlossen. 50 Jahre später liegt die Porosität in den Richtstrecken bei weniger als 10%. Weitere Zustände werden abschließend im Modellierungsbericht diskutiert.

Die Integritätsprüfung des Endlagersystems erforderte zahlreiche Entwicklungsarbeiten in dem Code PFLOTRAN. Mit diesen Entwicklungen konnten die ersten TH<sup>2</sup>C-Berechnungen für RANGERS in PFLOTRAN realisiert werden. Die Berechnungen beinhalten die gekoppelte Entwicklung des Systems unter Berücksichtigung von Lösungs-, Gas- und Wasserdampftransport. Der Wasserdampf entsteht aufgrund des gewählten Temperaturkriteriums von 200°C. Die Ergebnisse zeigen, dass der Wasserdampf durch das Gestein diffundiert. Aufgrund dieser Wasserdampfdiffusion bleibt der Fluiddruck im Endlager infolge der Wasserdampfentstehung geringfügig und beträgt wenige Atmosphären. Dies ist für die Integrität des Endlagersystems unkritisch. Weitere Variantenbetrachtungen unter Berücksichtigung von Gasentwicklung infolge Korrosion werden gegenwärtig durchgeführt und fließen in den Bericht ein.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

AP 5: Die Ergebnisse der numerischen Berechnungen werden im Modellierungsbericht diskutiert und ein Vergleich zu früheren Ansätzen dargestellt.

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

Simo, E.; Kuhlman, K.; Matteo, E.; Jayne, R.; Mills, M.; Lopez, C.; Hadgu, T.; Fukuyama, D.; Herold, P.; Keller, A.; Lommerzheim, A.; Leon Vargas, P. (2022) RANGERS – Engineered Barrier System, Presentation, PTKA Jour fixe 2023

<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> C3: Sicherheitsnachweis; C3.1 Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-)Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2020 bis 31.12.2024	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2023 bis 31.12.2023	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 735.947,00 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

Zur Untersuchung des Einflusses der Ionenstärke auf die Sorption von Gluconat (GLU) an C-S-H-Phasen wurden Konzentrationsisothermen unter Ar-Atmosphäre aufgenommen. Dabei wurden die GLU-Konzentrationen von  $10^{-1}$  bis  $10^{-9}$  mol/L bei konstanter C-S-H-Phase (S/L= 20 g/L) mit einem C:S-Verhältnis von 0,8 und 1,65 variiert. Als Hintergrundelektrolyt dienten VGL-C (verdünnte Gipshuttlösung ( $I = 2,5$  mol/L) kontaktiert an C-S-H-Phasen (S/L= 10 g/L) für 10 Tage, pH=10,5 (C:S = 0,8) und pH = 12,4 (C:S = 1,65) und C-S-H-Mutterlauge (Milli-Q-Wasser kontaktiert an C-S-H-Phasen (S/L= 10 g/L) für 10 Tage, pH=11,4 (C:S = 0,8) und pH = 13,0 (C:S = 1,65)). Die Ergebnisse zeigen, dass die Ionenstärke keinen Einfluss auf die Sorption hat. Ein höheres C:S-Verhältnis führt zu einer verstärkten Sorption ( $\log \bar{R}_d = 1,7 \pm 0,1$  (C:S = 0,8);  $\log \bar{R}_d = 2,6 \pm 0,2$  (C:S=1,65)). Um die mögliche Mobilisierungseffekte von GLU auf Pu zu untersuchen, wurden C-S-H-Phasen mit C:S-Verhältnissen von 0,8 und 1,65 in Gegenwart von Pu(IV) hergestellt und anschließend in Auslaugungsexperimenten mit  $10^{-2}$  mol/L GLU in VGL-C kontaktiert. Danach erfolgte eine regelmäßige Probenentnahme, um den zeitlichen Verlauf der Plutoniumauslaugung (bis zu 130 Tage) zu untersuchen. Die Bestimmung des Pu in den Proben wird zeitnah mittels ICP-MS erfolgen.

Des Weiteren wurde die Sorption von Pu(IV) an C-S-H-Phasen bei hoher Ionenstärke (VGL-C) mit Kontaktzeiten von 15 min bis 144 d untersucht. Die Ergebnisse zeigen, dass das System bereits nach wenigen Minuten im Gleichgewicht ist. Dieser Trend setzt sich auch bei längeren Kontaktzeiten fort, sodass sich nach 144 d keine signifikante Änderung mehr zeigt.

Um den Einfluss der Ionenstärke und des Eisenuntergrunds auf die Sorption von Pu(IV) zu untersuchen, wurde eine Sorptionsisotherme aufgenommen. Im Konzentrationsbereich von  $5 \times 10^{-9}$  bis  $5 \times 10^{-7}$  mol/L Pu(IV) war die Sorption linear mit einer Steigung von eins. Aus dem Ordinatenabschnitt des linearen Fits wurde ein  $\log(K_d)$ -Wert von 4,63 ermittelt. Die durch die verwendeten Chemikalien bedingte Untergrundkonzentration an Eisen lag in den Proben bei etwa  $10^{-7}$  mol/L. Die Probe mit der geringsten Pu(IV)-Konzentration wies eine Eisenkontamination auf.

In Anwesenheit von ISA ( $10^{-2}$  mol/L) wurde die Diffusion von  $^{238}\text{Pu(IV)}$  ( $c_0 = 1 \times 10^{-9}$  mol/L) in einen Zementkern (HCP) in VGL-Z (Zementporenwasser basierend auf VGL, pH 12,1) nach 123 Tagen abgeschlossen.

Der Versuch zur Diffusion von  $^{237}\text{Np(V)}$  ( $c_0 = 8 \times 10^{-6}$  mol/L) in einen Zementkern (HCP) und VGL-Z (pH 12,3) als Elektrolyt wurde fortgesetzt und soll in naher Zukunft beendet werden.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Abschluss der Batchversuche zur Plutoniumauslaugung aus dotierten C-S-H mittels GLU in VGL-C
- Einfluss der Reihenfolgezugabe auf die Sorption von Pu an C-S-H-Phasen in VGL-C in Anwesenheit von GLU
- Fortführung der Sorptionsexperimente von Pu(IV) an C-S-H-Phasen in VGL-C in Abwesenheit von Fe(II/III)
- Auswertung der Diffusionsexperimente mit  $^{237}\text{Np(V)}$  und  $^{238}\text{Pu(IV)}$  in HCP
- Charakterisierung weiterer Zementsteinproben in VGL-Z mittels HTO für geplante Diffusionsexperimente

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Stietz, J., Amayri, S., Häußler, V., Prieur, D., Reich, T.: Uptake of Pu(IV) by hardened cement paste in the presence of gluconate at high and low ionic strengths. *Frontiers in Nuclear Engineering* 2, 1268767 (2023).

Stietz, J., Amayri, S., Häußler, V., Scholze, R., Reich, T.: The Uptake of actinides by hardened cement paste in high-salinity pore water. *Minerals* 13, 1380 (2023).

<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-Förderprogramm:</b> C3: Sicherheitsnachweis; C3.1 Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-)Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2020 bis 31.12.2024	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2023 bis 31.12.2023	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 719.658,00 EUR	<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. Komplexbildung von Actiniden identifiziert werden. Weiterhin soll der Einfluss von Fe(II) auf die Redoxstabilität von Actiniden in höheren Oxidationsstufen speziell für U und Pu untersucht werden. Die Stabilität Actinid-dotierter Phasen in komplex zusammengesetzten Lösungen erhöhter Ionenstärke wird untersucht. Spektroskopische Untersuchungen der binären Uran(VI,IV)-Ligand-Systeme werden durchgeführt, um molekulare Strukturen und Komplexbildungskonstanten im zementrelevanten pH-Bereich zu ermitteln. Die geplanten Batchsorptionsexperimente und Komplexbildungsexperimente 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)-Komplexbildung 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

- Es wurden weitere  $^1\text{H-NMR}$ -Untersuchungen zur Ln(III)-Komplexierung durch Gluconat in Abhängigkeit der Ln(III)-Konzentration im pH-Bereich 1 bis 13 durchgeführt und kinetische Effekte untersucht.
- Mit systematischen Untersuchungen zur U(VI)-Citrat-Komplexierung im pH-Bereich 9 bis 13 wurde begonnen.  $^1\text{H-NMR}$ -Untersuchungen unter Variation der U(VI)- bzw. Citrat-Konzentration zeigten, dass U(VI)-Citrat-Komplexe bis pH 12 stabil sind.
- Die Komplexierung von U(IV) durch Nitrilotriessigsäure (NTA) wurde im pH-Bereich 1 bis 13 mittels  $^1\text{H-NMR}$ , UV-Vis und Dynamischer Lichtstreuung (DLS) untersucht. Bei  $\text{pH} \leq 7$  konnten mittels  $^1\text{H-NMR}$  zwei verschiedene U(IV)-NTA-Komplexe (1:1 und 1:2) beobachtet werden, welche jedoch bei  $\text{pH} > 7$  nicht mehr in der Lage sind, U(IV) gegenüber der Hydrolyse (und folgender Präzipitation) zu stabilisieren.
- Die experimentellen Untersuchungen zum Einfluss des Zementadditivs 2-Phosphonobutan-1,2,4-tricarboxylsäure (PBTC) auf die U(VI)-Rückhaltung an C-A-S-H-Phasen im Vergleich zu C-S-H-Phasen wurden weitergeführt. Die Retentionsmechanismen für U(VI) und PBTC wurden mittels Laserfluoreszenzspektroskopie und NMR detailliert untersucht.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

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

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

- Schmeide, K., Kretzschmar, J., Huittinen, N.M.: Influence of selected organics on the retention of uranium(VI) by calcium-(aluminate-)silicate-hydrate phases. Joint 6th International Workshop on Mechanisms and Modelling of Waste / Cement Interactions. 20.-22.11.2023, Prague, Czech Republic. (Vortrag)
- Wollenberg, A., Acker, M., Kretzschmar, J., Schmeide, K., Tsushima, S., Chiorescu, I., Krüger, S.: Influence of the cement additive PBTC on aquatic uranium(VI) speciation and retention on cementitious material. Joint 6th International Workshop on Mechanisms and Modelling of Waste / Cement Interactions. 20.-22.11.2023, Prague, Czech Republic. (Vortrag)
- Schmeide, K., Philipp, T., Huittinen, N.M., Shams Aldin Azzam, S., Kretzschmar, J.: U(VI) retention on bentonite and cementitious materials: Effect of increased ionic strengths and presence of organics. Migration 2023, 24.-29.09.2023, Nantes, France. (Vortrag)
- Wollenberg, A., Kretzschmar, J., Tsushima, S., Kraft, R., Kumke, M., Acker, M., Taut, S., Stumpf, T.: Structural identification of aquatic U(VI)-PBTC complexes by spectroscopic investigations. Migration 2023, 24.-29.09.2023, Nantes, France. (Vortrag)
- Sieber, C., Kretzschmar, J., Drobot, B., Tsushima, S., Schmeide, K., Stumpf, T.: Eu(III) and Cm(III) complexation by nitrilotriacetic acid to further evaluate its impact on the radionuclide retention by cementitious phases. Migration 2023, 24.-29.09.2023, Nantes, France. (Poster)
- Kretzschmar, J., Schmeide, K., Brendler, V., Stumpf, T.: NMR spectroscopy at the Institute of Resource Ecology. 44<sup>th</sup> GDCh FGMR Annual Discussion Meeting 2023. 18.09.-21.09.2023, Konstanz, 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> C3: Sicherheitsnachweis; C3.1 Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-)Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2020 bis 31.12.2024	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2023 bis 31.12.2023	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 539.828,50 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, Komplexbildung, Redoxtransformation und Löslichkeit mit experimentellen und ggf. quantenchemischen Methoden studiert, auf molekularer Ebene aufgeklärt und mit thermodynamischen Modellen beschrieben. Auf der Basis der erzielten Ergebnisse soll kritisch bewertet werden, in wieweit vorhandene Befunde für Systeme niedriger Ionenstärke auf die Bedingungen mittlerer bis hoher Ionenstärke gemäß dem Standortmodell NORD anwendbar sind.

## 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

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

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

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

AP 3: Nachwuchsförderung im Bereich der nuklearen Entsorgung.

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

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP 1: Der Einfluss von EDTA auf die Sorption von Cm(III) an CSH-Phasen wurde mittels TRLFS vertieft untersucht. Fokus lag auf sehr langen Kontaktzeiten von bis zu einem Jahr. Die Ergebnisse zeigen, dass selbst über diese sehr lange Zeit hinweg der ternäre Ca-Cm(III)-EDTA Komplex und der quaternäre Ca-Cm(III)-OH-EDTA Komplex stabil in Lösung vorliegen und hierdurch der Einbau des Cm(III) in die Struktur der CSH-Phase effektiv unterdrückt wird. Zusätzlich zu den Untersuchungen in Anwesenheit von CSH-Phasen, wurde eine thermodynamische Charakterisierung dieser ternären und quaternären Spezies in der wässrigen Phase mittels TRLFS durchgeführt. Anhand der Emissionsspektren konnten die Molfraktionen der jeweiligen Komplexe quantifiziert werden. Hieraus wurden für die Bildung des quaternären Ca-Cm(III)-(OH)-EDTA Komplexes aus der ternären Ca-Cm(III)-EDTA Spezies die konditionalen Stabilitätskonstanten  $\log \beta'(I_m = 0,51) = 2,97 \pm 0,23$  und  $\log \beta'(I_m = 2,09) = 4,56 \pm 0,26$  ermittelt.

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

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

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

### 4. Geplante Weiterarbeiten

AP 1: (i) Auswertung der EXAFS Daten zur strukturellen Aufklärung der ternären und quaternären Komplexe. (ii) Anfertigung eines Manuskripts zum Einfluss von EDTA auf die Sorption von Eu(III)/Cm(III) an CSH Phasen in salinaren NaCl/CaCl<sub>2</sub> Lösungen. Einreichung des Manuskripts zur Veröffentlichung in einem Peer-Review-Journal.

AP 2: (i) Veröffentlichung der Studie zu den TRLFS Analysen im U(VI)-Silikat System; (ii) Abschluss der Löslichkeitsexperimente und spektroskopischen Untersuchungen der An(IV)-Silikat und An(III,IV)-Citrat Systeme, einschließlich der Bewertung des Einflusses von Ca; (iii) Beginn der Erstellung des Abschlussberichts.

AP 3: Das 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 der kommenden Projektphase geplant.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Vortrag: A. Thumm et al., *Sorption of Eu(III) and Cm(III) on C-S-H phases in presence of EDTA at intermediate ionic strength conditions*, 6<sup>th</sup> International Workshop on Mechanisms and Modelling of Waste / Cement Interactions (Prag, 20.-22. Nov. 2023).

Poster: (i) A. Thumm et al., *Sorption of Eu(III) and Cm(III) on C-S-H phases in presence of EDTA at intermediate ionic strength conditions*, Migration-Konferenz (Nantes, September 2023), (ii) Ch. Shang et al., *Experimental and Computational Evidence of U(VI)-OH-Si(OH)<sub>4</sub> Complexes under Alkaline Conditions: Implications for Cement Systems*, Migration-Konferenz (Nantes, 24.-29. Sept. 2023).

<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> Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt D		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> C3: Sicherheitsnachweis; C3.1 Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-)Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.01.2021 bis 31.12.2024	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2023 bis 31.12.2023	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 656.091,50 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Kautenburger	

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

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

### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Untersuchungen zur Retention von endlagerrelevanten Elementen bzw. Elementgemischen (Waste-Cocktail) an Korrosionsprodukten von Stahlbeton und Zementalterationsphasen unter dem Einfluss von hochsalinaren und hyperalkalinen Bedingungen
- AP2: Untersuchungen zur Retention an Festphasen unter dem Einfluss von Zementzusätzen unter hochsalinaren und hyperalkalinen Bedingungen
- AP3: Untersuchungen zur Fixierung und Remobilisierung der Waste-Cocktail-Elemente aus dotierten Festphasen
- AP4: Untersuchung zur Remobilisierungskinetik eingebauter Radionuklide aus dotierten Festphasen durch Konkurrenzreaktionen
- AP5: Zeitabhängige Retention des Waste-Cocktails an Festphasen im Batch und vergleichend in MSE sowie Implementierung einer LA-ICP-MS-Kopplung zur Untersuchung der Elementverteilung in den Festphasen
- AP6: Nachwuchsförderung und Kompetenzerhalt auf dem Gebiet der Geochemie und Radionuklidrückhaltung

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im Untersuchungszeitraum wurde die Reproduzierbarkeit der C-S-H-Phasen-Synthese überprüft. Dabei wurden C-S-H-Phasen ( $C/S = 1,08$ ) im Rotationsschüttler und auf einer Schüttelplatte mit und ohne 2-Phosphonbutan-1,2,4-tricarbon-säure- (PBTC-) Zusatz als Triplikate nasschemisch hergestellt. Anschließende XRD- und TG-IR-Analysen zeigten, dass die Wahl des Schüttlers unerheblich ist; beide Syntheserouten kommen zum gleichen Ergebnis. Dabei konnte für die C-S-H-Phasen ohne PBTC eine dominante Tobermorit-11Å-Phase mit Xonotlit und Calcit als Nebenphasen nachgewiesen werden. Die TG-IR-Daten untermauern dieses Ergebnis. Bei den C-S-H-Phasen mit PBTC konnte im XRD  $Ca(OH)_2$  als Hauptphase mit geringem Anteil an Calcit bestimmt werden. Auch in diesem Fall untermauern die TG-IR-Daten das Ergebnis, wobei hier noch deutlich auf gebundenes PBTC geschlossen werden kann. Auf Grund der höheren Kristallinität des Portlandit und der damit einhergehenden höheren Empfindlichkeit im XRD, kann an der Stelle eine zu Teilen vorhandene Tobermorit-Phase aber nicht ausgeschlossen werden.

Zudem wurden die Batch-Experimente zum Einfluss von PBTC auf den Rückhalt des Waste Cocktails (WC) an C-S-H-Phasen abgeschlossen. Es wurde sowohl das kommerziell erhältliche Circosil mit Zugabe von PBTC in Lösung untersucht als auch nasschemisch synthetisierte C-S-H-Phasen, denen während der Herstellung PBTC zugegeben wurde. Ein Einfluss der letztgenannten C-S-H-Phasen im Vergleich zu Circosil ohne PBTC-Zugabe war nur für Cs(I) in 0,1 M NaCl zu beobachten. Der Rückhalt sank von ca. 50% auf weniger als 40%. Dieser Effekt ist entweder auf das höhere C/S-Verhältnis der synthetisierten Phasen (1,08) in Vergleich zu Circosil (0,83) oder auf den höheren Portlandit-Anteil in den synthetisierten C-S-H-Phasen zurückzuführen. Bei allen anderen WC-Elementen mit Ausnahme von Mo(IV), das an C-S-H-Phasen gar nicht bis schwach zurückgehalten wird, führte die Anwesenheit von freiem PBTC in Lösung zu geringerem Rückhalt am Adsorbensmaterial. Dieser Effekt ist in 0,1 M NaCl ausgeprägter als in verdünnter Gipshuttlösung, was auf die hohe Ca(II)-Konzentration in Lösung (20 mM) zurückzuführen sein kann. Der Einfluss von Fe(II) auf den Rückhalt in Anwesenheit von PBTC zeigt sich vor allem für Pd(II). Der Rückhalt an Circosil in 0,1 M NaCl sinkt bei Anwesenheit von PBTC von etwa 80% auf weniger als 40% ab. Bei gleichzeitiger Zugabe von 50  $\mu$ M Fe(II) bleibt der Rückhalt bei 70-80%.

Bisherige Arbeiten wurden überwiegend an Circosil durchgeführt. Ergänzend wurden Vergleichende Batch-Experimente des WC an selbst synthetisierten C-S-H-Phasen mit gleichem C/S (0,83) in 0,1 M NaCl durchgeführt. Dabei wichen die  $\log(R_d)$  Werte für Sm(III) und Eu(III) nur um 4,9% und 9,3% ab. Im Fall von Zr(IV), Ru(III) und U(VI) beläuft sich die Abweichung der  $\log(R_d)$  aber schon auf 19,0%, 13,4% und 16,6%; bei Pd(II) und Cs(I) sind es schon 31,7% und 22,8%. Für den Rückhalt von Mo(VI) konnte an beiden Adsorptiven keine Retention gemessen werden.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Im nächsten Untersuchungszeitraum soll die zeitaufgelöste Retention des WC an C-S-H in Anwesenheit von PBTC untersucht werden. Diese soll dann später unterstützend zu Batch-Experimenten und MSE angewandt werden. Ferner sollen die Experimente mit den dotierten C-S-H-Phasen fortgeführt werden. Dazu soll eine neue Routinemethode zur Quantifizierung von Analyt-Konzentrationen in C-S-H-Festphasen mittels Laserablation-ICP-MS (LA-ICP-MS) entwickelt und optimiert werden. Daran anschließend soll der Bindungsmechanismus der „dotierten“ Analyten in den C-Batch-Experimenten, MSE und LA-ICP-MS aufgeklärt werden.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Bachmann N. (2023) Untersuchung der Adsorption von Cs(I) an Circosil mittels Batch- und Minisäulen-Experimenten. Vertiefungsarbeit Analytische Chemie, Fakultät NT, Universität des Saarlandes.

Brix K, Haben A, Kautenburger R. (2023) Time-Dependent Retention of a Mixture of Cs(I), Sm(III), Eu(III) and U(VI) as Waste Cocktail by Calcium Silicate Hydrate (C-S-H) Phases. *Minerals* 13(12):1469. <https://doi.org/10.3390/min13121469>.

<b>Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer:</b> Technische Universität München		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11860E</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt E		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> C3: Sicherheitsnachweis; C3.1 Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-)Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2020 bis 31.12.2024	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2023 bis 31.12.2023	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 691.168,00 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 1.1: 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

Um zu besseren Modellen für gealterte CSH-Phasen ( $C/S < 1$ , hoher pH) zu kommen, wurden im Tobermoritmodell für  $C/S = 0.67$  die Hälfte der Protonen der verbrückenden Silikattetraeder durch  $\text{Na}^+$  ersetzt (AP 1.1). Dabei erwies sich die Protonierung verschiedener Silanolgruppen der Silikattetraeder als nahezu entartet. Für zwei von bisher drei untersuchten Sorptionsplätzen von U(VI) in  $\text{Na}^+$ -substituiertem Tobermorit wurde erwartungsgemäß im Gegensatz zu idealem Tobermorit Hydrolyse gefunden. Rechnungen zur Sorption von Th(IV) in CSH wurden für  $C/S = 1$  fortgesetzt (AP 1.4). Für die Adsorption in der Zwischenschicht von Tobermorit wurden Strukturen ergänzt und verbessert. Für die meisten Sorptionsplätze werden gleiche Spezies wie für U(IV) gefunden, die in der Regel und bezogen auf Aquakomplexe weniger stabil sind. Weitere Arbeiten zu den Unterschieden zwischen U(IV) und Th(IV) sind notwendig. Um den Einfluss von Fe(II) auf die Sorption von Uran zu untersuchen (AP 1.5), werden Rechnungen an Tobermoritmodellen mit zwei Eisen-substitutionen und Uran durchgeführt. Der Vergleich von Modellen mit U(VI) und Fe(II) in der Zwischenschicht mit solchen mit U(IV) und Fe(III) erlaubt Einblick in die Reduzierbarkeit von U(VI) durch Fe(II). Vorläufige Ergebnisse für drei Sorptionsplätze für Uran zeigen geringe Energieunterschiede, die darauf hindeuten, dass U(VI) nicht von Fe(II) reduziert wird. Diese Arbeiten werden für weitere Sorptionsplätze fortgesetzt.

Zur Thematik der U(VI)-Silikatkomplexe wurden Rechnungen zu Komplexen mit Tetrasilikat erweitert (AP 2.2) und ternäre Hydroxo-Silikatkomplexe neu untersucht (AP 2.1). U(VI)-Komplexe mit ringförmigem Tetrasilikat wurden für die ersten beiden Deprotonierungsstufen des Tetrasilikats betrachtet. In Übereinstimmung mit der niedrigeren Deprotonierungsenergie des Tetrasilikats gegenüber Mono- und Disilikat zeigen auch die U(VI)-Komplexe eine geringere Stabilität. Die stabilsten Isomere von  $\text{UO}_2\text{O}_{4+n}\text{Si}_4(\text{OH})_{8-n}^{2-n}$  zeigen für  $n = 0$  und  $1$  eine monodentate Koordination und eine äquatoriale Koordinationszahl (CN) von 5 am Uran. Für  $n = 2$  liegt ein Chelatkomplex mit  $\text{CN} = 4$  vor. Für  $n = 1$  und  $2$  finden sich nahezu entartete Isomere bezüglich der CN. Ternäre U(VI)-Hydroxo-Silikatkomplexe mit bis zu zwei  $\text{OH}^-$ - und einem Monosilikatliganden wurden modelliert. Trotz des stärkeren  $\text{OH}^-$ -Liganden bilden sich  $\text{UO}_2(\text{OH})\text{OSi}(\text{OH})_3^+$  und  $\text{UO}_2(\text{OH})_2\text{OSi}(\text{OH})_3^0$  aus den Hydroxokomplexen exotherm, womit diese trotz Uranhydrolyse möglich sind. Uran zeigt in diesen Komplexen eine bevorzugte äquatoriale CN von 4 im Gegensatz zu binären Silikatkomplexen und damit kürzere Bindungen  $\text{U-O}_{\text{aq}}$ . Der Abstand U-Si wird vom  $\text{OH}^-$ -Liganden nicht beeinflusst.

Zu Experimenten von Projektpartnern zur Komplexbildung des Modellzementadditivs PBTC wurden weitere Rechnungen zu U(VI)-PBTC-Komplexen unternommen. (AP 3). Auch verbesserte Energien zeigen, dass ein 1:3-Komplex unwahrscheinlich ist. Enantiomere der 1:2-Komplexe sind entartet. Berechnete Uranyl-schwingungen geben die Trends aus IR/Raman-Messungen qualitativ wieder und werden weiter analysiert. Zur Unterstützung von Experimenten an Lanthanid-Gluconat-Komplexen (AP 3) von Projektpartnern werden derzeit vorbereitende Rechnungen zum  $\text{La}^{3+}$ -Ion und seinen Hydroxokomplexen durchgeführt.

### 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 Silikatkomplexe; AP 3: Unterstützung Experimente.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

I. Chiorescu, S. Krüger, Vortrag „DFT modeling of Am(III) hydroxo complexes with Ca or Mg counter ions. Do Mg-stabilized species exist?“; I. Chiorescu, A. Kremleva, S. Krüger, Poster „Actinide(IV) interactions with calcium silicate hydrate: Sorbed species and comparison of sorption modes by means of density functional calculations“ Konferenz Migration 2023, 24.-29.9.2023, Nantes, Frankreich.

<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		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> C3: Sicherheitsnachweis; C3.1 Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-)Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2020 bis 31.12.2024	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2023 bis 31.12.2023	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 546.703,00 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

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

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Nachdem im AP1 bereits ausführlich das Eu(III)/C-S-H/Ligand-System (Ligand=NTA oder Gluconat) bei C/S=0.80 und 1.65 untersucht wurde, wurden nun neue Experimente bei verschiedenen C/S-Verhältnissen dazwischen (C/S=0.9, 1.0, 1.2, 1.4) begonnen. Während bei C/S=0.80 nahezu das gesamte Eu(III) in Form einer Ca-Si-Eu-Mischphase präzipitiert und bei C/S=1.65 das Eu(III) stattdessen an die C-S-H Phasen sorbiert, konnte gezeigt werden, dass bei C/S Verhältnissen dazwischen eine Kombination aus beiden Prozessen stattfindet. Weiterhin wurden Sorptionsexperimente mit dem kommerziellen C-S-H-Material Circosil (C/S≈0.8) durchgeführt, in denen ebenfalls die Bildung einer Ca-Si-Eu-Mischphase beobachtet wurde. In Langzeitexperimenten bei C/S=1.65 wurde beobachtet, dass NTA- und Gluconat-Konzentrationen bis ca.  $1 \times 10^{-3}$  M die Eu(III)-Speziation bei langer Kontaktzeit (> 1 Jahr) nicht verändern und die Sorption an die C-S-H Phasen durch Auflösung des zunächst präzipitierten Eu-Hydroxids stark beschleunigen. Bei höheren Gluconat-Konzentrationen traten jedoch auch Eu-Glu-Komplexen auf. Mit dem Ziel, die Stöchiometrie und Stabilitätskonstanten dieser Komplexe zu bestimmen, wurden die bereits begonnenen Arbeiten zum binären Ln(III)/Gluconat-System (Ln=Eu, Sm) in Kollaboration mit dem HZDR und der JGU Mainz in einem breiten pH- und Konzentrationsbereich fortgeführt.

Mittels Transienten-Absorptionsspektroskopie (TAS) wurde begonnen, verschiedene U(VI)-Hydrolyse Komplexe zeitaufgelöst zu charakterisieren. Weiterhin wurde in Zusammenarbeit mit den Projektpartnern der TU Dresden das U(VI)-PBTC-System charakterisiert.

Darüber hinaus wurden Messungen am Phenanthrolin- und Salicylat-Systemen (organ. Modellliganden für Zementadditive) durchgeführt, vor allem in Kombination mit Kupfer und Eisen als Metall. Auch die Speziation der reinen Liganden wird weiter verfeinert. Zusätzlich wurde die Flash-Photolyse zur Untersuchung kinetischer Prozesse der Salicylat-Systeme genutzt, da diese für langsame Kinetiken auf der  $\mu$ s-Zeitskala besser geeignet ist.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

In AP1 soll der Einfluss der Liganden NTA und Gluconat auf die Zusammensetzung und Bildungskinetik der Ca-Si-Eu-Mischphase bei C/S=0.8 genauer untersucht werden, wobei vor allem der Zugabezeitpunkt der Liganden variiert werden soll. Die aktuell laufenden Sorptionsexperimente werden bis zum Erreichen des thermodynamischen Gleichgewichts weiter mittels TRLFS untersucht. Anschließend soll die Zusammensetzung der wässrigen Phasen mit ICP-OES bestimmt werden. Die Untersuchungen zum binären Ln(III)/Gluconat-System (Ln=Eu, Sm) sollen mit Fokus auf den hyperalkalinen pH-Bereich fortgeführt werden und gegebenenfalls auch auf die Zugabe von Ca(II) ausgeweitet werden.

Die Zusammenarbeit mit den Projektpartnern der TU Dresden am U(VI)-PBTC-System wird fortgesetzt. Darüber hinaus wird die Hydrolyse von reinem U(VI)-Nitrat weiter charakterisiert. Auch weitere Untersuchungen der einzelnen Liganden, sowie deren Komplexe mit Metallen werden mittels TAS und Flash-Photolyse durchgeführt. Zudem werden mittels Flash-Photolyse Salicylat-Europium Komplexe charakterisiert.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

(Es sind zwei Publikationen in Vorbereitung, eine davon gemeinsam mit dem HZDR und der JGU.)

<b>Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer:</b> TU Dresden, Professur für Radiochemie und Radioökologie, Sachgebiet Strahlenschutz		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11860G</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundvorhaben: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt G		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> C3: Sicherheitsnachweis; C3.1 Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-)Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2023 bis 31.12.2024	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2023 bis 31.12.2023	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 450.133,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Thorsten Stumpf	

### 1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

### 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

Die Arbeiten dieses Projekt sind im Wesentlichen in das Verbundarbeitspaket AP2 „Wechselwirkung von Actiniden mit organischen und silikatischen Liganden“ angesiedelt. Das AP-TU1 beinhaltet die thermodynamische Charakterisierung der Protonierung des PBTC-Liganden, die ausführliche thermo-dynamische und strukturelle Charakterisierung der Komplexierung der Actinide (u.a. Am(III), Cm(III), Pu(III), Th(IV), U(VI), ggf. inaktive Analoga Eu(III), Nd(III)) mit dem PBTC-Liganden im sauren und alkalischen pH-Bereich als Funktion der Ionenstärke an NaCl und CaCl<sub>2</sub> sowie Untersuchungen zum Einfluss von Konkurrenzmetallionen (z.B. Fe<sup>2+</sup>) auf die Komplexierung. Entsprechende thermodynamische Standarddaten zur Komplexbildung ( $\log_{10}\beta_{n,m}^0$ ,  $\Delta_r H_m^0$ ,  $\epsilon_{j,k}$ ) werden aus SIT-Modellierungen abgeleitet. Im AP-TU2 wird der Einfluss von relevanten Liganden (Citrat, PBTC, Gluconat) auf die Eigenschaften von silikatischen Lösungen/Suspensionen bezüglich ihrer Speziation und daraus abgeleitet auf die Wechselwirkungen mit Actiniden untersucht. Geplant sind Batchsorptionsuntersuchungen mit Actiniden in gut charakterisierten (Poly)silicat-Ligand-

Suspensionen. Die Sorptionsisothermen und Verteilungskoeffizienten ( $K_d$ -Werte) sollen als Funktion der Ionenstärke (bis 3 m NaCl, CaCl<sub>2</sub>) und des pH-Wertes bestimmt werden.

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

1) Die TRLFS-Untersuchungen des Eu(III)-PBTC-Systems wurden fortgesetzt. Die Stabilität der gebildeten Komplexe wurde untersucht. Hierfür wurden fluoreszenzspektroskopische pH-Titrationen sowohl vom sauren in den basischen pH-Bereich als auch umgekehrt bei konstantem Eu(III)-PBTC-Verhältnis durchgeführt. Eine erste Analyse der Daten ergibt zwei unterschiedliche Eu(III)-PBTC-Komplexspezies: Spezies 1  $3 < \text{pH} < 6$ , Spezies 2  $7 < \text{pH} < 9$ , wobei jeweils von einem Eu(III)-PBTC-Verhältnis von 1:1 ausgegangen wird.

2) Komplementäre UV-Vis-Untersuchungen mit Nd(III) (zur Vorbereitung analoger UV-Vis-Experimente mit Am(III)) ergaben eine ähnliche Speziation wie die TRLFS-Untersuchungen des Eu(III)-PBTC-Systems. Abweichungen zeigten sich jedoch im alkalischen pH-Bereich ab  $\text{pH} \geq 9$ . Im Nd(III)-PBTC-System konnte eine dritte Komplexspezies nachgewiesen werden. Die Diskrepanz zu den TRLFS-Untersuchungen kann auf eine faktoranalytische Überbestimmung der Nd(III)-PBTC-Komplexspezies oder auf eine fluoreszenz-inaktive Eu(III)-PBTC-Komplexspezies zurückgeführt werden. Durch pH-abhängige NMR-Untersuchungen im System Ln(III)-PBTC (Ln = Eu, Nd, La) soll diese Diskrepanz aufgeklärt und die Komplexstruktur bestimmt werden.

3) Die theoretischen Berechnungen zur U(VI)-PBTC Komplexierung wurden vom Projektpartner an der Universität München fortgeführt, um bestehende Diskrepanzen zwischen theoretischen und experimentellen Ergebnissen zu klären. Die theoretischen Daten werden für die Fertigstellung der Publikation benötigt.

4) Die ITC-Untersuchungen (ITC = isotherme Titrationskalorimetrie) der Eu(III)-PBTC-Komplexierung in verschiedenen Puffersystemen (MES-, PIPES, MOPS, TRIS-Puffer,  $\text{pH} \sim 7$ ,  $c_{\text{Puffer}} = 0.1 \text{ M}$ ,  $I = 0,5 \text{ m NaCl}$ ) wurden fortgeführt. Durch die Verwendung der Puffer kann der unspezifische Einfluss der pH-Änderung auf die Wärmekurven infolge der durch die Komplexierung erzwungenen Deprotonierung der bindenden Carboxylgruppe vernachlässigt werden. Der Verlauf der ITC-Wärmekurven deutet auf zwei Eu-PBTC-Komplexspezies hin. Die Auswertung mit zwei Spezies ergab eine lineare Abhängigkeit der Eu(III)-PBTC-Komplexierungsenthalpien von der Pufferionisationsenthalpie. Dies erlaubt die Bestimmung der Eu(III)-PBTC-Komplexierungsenthalpien sowie der entsprechenden Komplexierungskonstanten. Derzeit werden weitere ITC-Experimente mit variablen Puffer-, Eu(III)- und PBTC-Konzentrationen durchgeführt, um die bisher berechneten thermodynamischen Daten zu verifizieren.

5) Im Berichtszeitraum wurden Ergebnisse des U(VI)-PBTC-Systems auf internationalen Konferenzen präsentiert (siehe Punkt 5, Koautoren sind Projektpartner der TU München, der Uni Potsdam und des HZDR), einschließlich der Vorbereitung. Ein Entwurf für die Publikation der Ergebnisse wurde erstellt.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

1) Finalisierung der Veröffentlichung der Ergebnisse des U(VI)-PBTC-Systems

2) Fortführung der Untersuchung des Am(III)/Eu(III)/Nd(III)-PBTC-Systems mittels NMR-, UV-Vis-, und TRLFS-Spektroskopie, Bestimmung der Speziation sowie Struktur der Komplexspezies

3) UV-Vis-Untersuchungen zur Bildung von U(IV) im U(VI)-PBTC-System bei Energieeintrag (vorrangig durch UV-Licht, Gammastrahlung)

4) Fortführung der ITC-Experimente (ITC = isotherme Titrationskalorimetrie) im Eu(III)-PBTC-System (Einsatz weiterer Puffer mit verschiedenen pH-Pufferbereichen)

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

**Posterbeitrag:** M. Acker, A. Wollenberg, S. Taut, T. Stumpf: *Thermodynamic Study of Complexation of Lanthide/Actinide with Cement Additives by Isothermal Micro-Titration Calorimetry*, 18th International Conference on Chemistry and Migration Behaviour of Actinides and Fission Products in the Geosphere (Migration), 24. - 29. September, 2023, Nantes, Frankreich

**Vortrag:** A. Wollenberg, J. Kretzschmar, S. Tsushima, R. Kraft, M. Kumke, M. Acker, S. Taut, T. Stumpf: *Structural Identification of Aquatic U(VI)-PBTC Complexes by Spectroscopic Investigations*, 18th International Conference on Chemistry and Migration Behaviour of Actinides and Fission Products in the Geosphere (Migration), 24. - 29. September, 2023, Nantes , Frankreich

**Vortrag:** A. Wollenberg, J. Kretzschmar, K. Schmeide, M. Acker, S. Taut, T. Stumpf: Characterization of highly soluble U(VI)-PBTC complexes 5th International Caparica Conference on Pollutant Toxic Ions and Molecules (PTIM) 2023, 6.-9 November 2023, Lissabon, Portugal

**Vortrag:** M. Acker, A. Wollenberg, J. Kretzschmar, I. Chiorescu, S. Krüger, K. Schmeide: *Influence of the cement additive PBTC on aquatic uranium(VI) speciation and retention on cementitious material*, 6th International Workshop on Mechanisms and Modelling of Waste / Cement Interactions, 20. - 24. November 2023, Prag, Tschechien

<b>Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer:</b> Universität Heidelberg		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11860H</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt H		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> C3: Sicherheitsnachweis; C3.1 Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-)Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2020 bis 31.05.2025	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.08.2023 bis 31.12.2023	
<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

Im Rahmen von AP 2.3 wurde mittels zeitaufgelöster Laserfluoreszenzspektroskopie (TRLFS) die Speziation von Cm(III) mit Silicaten im pH-Wertbereich 0.8 bis 12.5 untersucht. Die gewählten Si-Konzentrationen bewegten sich hierbei oberhalb der Sättigungsgrenze ( $5 \cdot 10^{-3}$  M bis  $2.1 \cdot 10^{-2}$  M). Die Speziationsuntersuchungen wurden entweder vom Basischen ins Saure oder vice versa durchgeführt, wobei unterschiedliche Speziationen festgestellt wurden.

Im Falle der Untersuchungen vom Säuren ins Basische wurde mit zunehmendem pH-Wert die Cm-Silicat-Spezies  $\text{Cm}[\text{H}_3\text{SiO}_4]^{2+}$  bei  $\lambda = 598.5$  nm, die polymere Cm-Silicat-Spezies (I) bei  $\lambda = 603.2$  nm und die polymere Cm-Silicat-Spezies (II) bei  $\lambda = 606.2$  nm beobachtet. Die hier erhaltenen Emissionsbanden stehen dabei in sehr guter Übereinstimmung mit Literaturdaten. Für pH-Werte  $> 9.5$  tritt zunehmend Hydrolyse auf, die im pH-Bereich  $> 10.5$  die Speziation des Cm(III) dominiert.

Bei den Untersuchungen vom Basischen ins Saure wurden ebenfalls drei Cm-Silicat-Spezies beobachtet:  $\text{Cm}[\text{H}_3\text{SiO}_4]^{2+}$  bei  $\lambda = 598.5$  nm, die polymere Cm-Silicat-Spezies (II) bei  $\lambda = 606.2$  nm sowie eine neue polymere Cm-Silicat-Spezies (III) bei  $\lambda = 601.8$  nm, die ebenfalls in der Literatur beschrieben wurden. Dabei ist zudem zu sehen, dass selbst bei einem pH = 1 noch polymere Spezies vorliegt. Dies deutet darauf hin, dass der Polymerabbau unter sauren Bedingungen einer sehr langsamen Kinetik unterliegt. Darüber hinaus wird auch im basischen pH-Bereich ein kinetischer Effekt beobachtet, bei dem Polymer (II) das  $\text{Cm}^{3+}$  für mehrere Stunden (maximal 24 h) in Lösung hält, bevor die vollständige Hydrolyse einsetzt.

Weiterhin wurden vergleichbare Speziationsuntersuchungen bei Ionenstärken von  $I_m(\text{NaCl}) = 0.99$  m und  $I_m(\text{NaCl}) = 2.99$  m und einer Si-Konzentration von  $c(\text{Si}) = 5 \cdot 10^{-3}$  M durchgeführt. Hierbei wurde beobachtet, dass mit steigender Ionenstärke der Maximalanteil an Cm-Silicat-Spezies (II) bei  $\lambda = 606.2$  nm signifikant abnimmt (z.B. auf 5% bei  $I_m(\text{NaCl}) = 2.99$  m). Dies deutet darauf hin, dass diese polymere Spezies bei höheren Ionenstärken destabilisiert wird und somit für die Speziation des Cm(III) keine Rolle mehr spielt. Unabhängig von diesem Ergebnis wird ab pH = 9.5 die Speziation vollständig von der Hydrolyse dominiert.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Speziationsuntersuchungen zur Wechselwirkung von Cm(III) mit Silicaten im  $\text{CaCl}_2$ -System als Funktion des pH-Wertes und der Ionenstärke
- Untersuchungen zum Einfluss der Ionenstärke auf die Stabilität von Silicakolloiden
- Speziationsuntersuchung der Wechselwirkung von An(III)/Ln(III) mit polymeren Polycarboxylat-Superplasticizern im neutralen und alkalischen pH-Bereich

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Praktikumsbericht: Komplexierung von Cm(III) mit polymeren Silikaten als Funktion der Ionenstärke und des pH-Wertes, Fabian Grieser, Universität Heidelberg, 2023.

<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> Im Projektförderprogramm des BMWi – Forschungsförderung zur nuklearen Sicherheit (2021-2025) – ist das Vorhaben dem FuE-Bereich C2 „Sicherheits- und Endlagerkonzepte; Endlagertechnik und (geo-)technische Barrieren“, FuE-Feld C2.3 „Geotechnische und technische Barrieren“, FuE-Thema „Untersuchungen zu Material und an Komponenten von Barriersystemen, einschließlich zu Prozessen der Radionuklidrückhaltung durch geotechnische Barrieren (Schnittstelle zu FuE-Feld C3.1)“ sowie dem FuE-Feld C3.1 „Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-)Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung“, FuE Thema „Weiterentwicklung des Verständnisses zu den im Endlagersystem und der Biosphäre ablaufenden thermischen, hydraulischen, mechanischen, chemischen und biologischen (THMCb-)Prozessen und ihrer Kopplung“ zuzuordnen.			
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.01.2021 bis 30.06.2025		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2023 bis 31.12.2023	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 1.012.603,13 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 Durchführung der Versuchsreihe zur Ermittlung der Abhängigkeit der Karbonatzersetzungsrate von der Art des Karbonatminerals in Kontakt mit reaktiven Mineralphasen Pyrit und Quarz fortgesetzt. Sie besteht aus 15 Gemischen, die aus Kalzit bzw. 10 weiteren Karbonatmineralen sowie Quarz und Pyrit (in unterschiedlichen Anteilen für Batches mit Kalzit) zusammengesetzt wurden. Für diese Versuchsreihe wurden statt der bisher als Autoklaven verwendeten Probenentnahmezylindern der Fa. Swagelok die Glasreaktoren der Fa. Büchi eingesetzt, die ein deutlich verbessertes Handling der Versuche und der Gasprobenahme ermöglichen. 12 der 15 Versuche und die Analysen der in Versuchen freigesetzten Gase wurden abgeschlossen.

Die Koordination des Verbundprojektes bestand in der Organisation des sechsten Präsenzworkshops, welches am 6. Dezember 2023 durch das Institut für Bodenkunde der LUH in Hannover ausgerichtet wurde.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

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

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

Keine

<b>Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer:</b> Helmholtz-Zentrum Dresden – Rossendorf e. V. Institut für Ressourcenökologie		<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-Programm:</b> C3: Sicherheitsnachweis; C3.1 Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-)Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.01.2021 bis 30.06.2025	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2023 bis 31.12.2023	
<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 Karbonate ablaufen kann. Im Projekt UMB-II sollen die beteiligten Reaktionsmechanismen aufgeklärt werden. Weitere Arbeitsschwerpunkte sind (i) die Abhängigkeit der Lösungsrate der Smektite vom Bentonit-Typ, (ii) der Einfluss der Fe(II)/Fe(III)-Redoxreaktion (experimenteller und quantenchemischer Ansatz), (iii) die Unterschiede in Korrosionsraten und –produkten an einer Eisen-Bentonit-Grenzfläche (mit Einsatz einer zu optimierenden Mössbauerspektroskopie) und (iv) der Einfluss der Bentonit-eigenen mikrobiellen Population.

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

### Beziehung zu anderen Vorhaben

Innerhalb der Kooperationspartner (Förderkennzeichen 02E11870)

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

### • 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

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

1. Ansetzen und Beprobieren von Mikrokosmen über einen Zeitraum von Mindestens 12 Monaten
2. Bestimmung bio-geochemischer Parameter (z.B. pH-Wert, E<sub>h</sub>, 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 anaeroben Ansätze enthalten einen der beiden Bentonite, Gusseisenplättchen und synthetische 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 811 Tagen Inkubation erfolgte die fünfte Beprobung der Mikrokosmen. In allen Ansätzen konnte ein Redoxpotential zwischen -350 und -400 mV festgestellt werden und daher sehr reduzierende Bedingungen für biotische und abiotische Prozesse. Des Weiteren zeigen alle Ansätze, welche mit Gusseisen versetzt worden sind, deutliche Anzeichen für eine fortschreitende Korrosion. So steigt in etwa die Eisenkonzentration im umgebenden Porenwasser bis 350 Tage Inkubation deutlich an. Zeitgleich steigen auch der Druck und die Wasserstoff-Konzentration im Gas Raum. Diese Prozesse sind stark beschleunigt bei 70°C. In fast allen Ansätzen erreicht die Eisenkonzentration nach 350 Tagen Inkubation ein Plateau und bleibt entweder konstant (37°C-Ansätze) oder sinkt auf einen minimalen Wert nach 811 Tagen ab (70°C-Ansätze).

Auffällig erscheinen sterile B27-Mikrokosmen, welche bei 37°C inkubiert wurden. Nach 196 Tagen findet hier eine beschleunigte Eisenfreisetzung in das umgebende Porenwasser statt, welche über den analysierten Zeitraum (bis 811 Tage) konstant hoch bleibt. Gusseisenoberflächen der entsprechenden Proben zeigen keine deutlichen Veränderungen. Entsprechende nicht sterile B27-Ansätze zeigen Ablagerungen auf der Gusseisenoberfläche und eine nur sehr geringe Eisen-Konzentration im Porenwasser. Elementar-Analysen zeigen, dass die Ablagerungen hauptsächlich aus Calcium, Sauerstoff und Kohlenstoff bestehen.

Im 6. Berichtszeitraum konnte die DNA von 18 Proben erfolgreich extrahiert und sequenziert werden. Sulfat- und Eisen-reduzierende Bakterien (SRB und IRB) waren dominant in allen (nicht sterilen) B27 Mikrokosmen. Indikatoren mikrobieller Aktivität konnten ebenfalls nachgewiesen werden (Verringerung der Sulfat-Konzentration, Sulfid-Bildung, Schwarzfärbung). In den entsprechenden sterilen Mikrokosmen dominieren Sporen-bildende thermophile und thermotolerante Bakterien.

Auch in GMZ-Mikrokosmen dominierten nach 595 Tagen Inkubation bei 37°C Sporenbildende SRB. Erste Analysen der Gusseisenoberflächen zeigen weniger Ablagerungen verglichen zu den entsprechenden B27-Ansätzen. Weitere Analysen der inkubierten Plättchen stehen noch aus.

### • 4. Geplante Weiterarbeiten

Nach der Verlängerung des UMB-II Projektes soll im 7. Berichtszeitraum die Extraktion der DNA und deren Sequenzierung aus inkubierten Ansätzen fortgeführt werden. Des Weiteren soll ein besonderer Fokus auf die Charakterisierung der inkubierten Gusseisenplättchen gelegt werden. Insbesondere die beobachteten Calcium-Ablagerungen, welche möglicherweise zu einer verminderten Eisenfreisetzung in den entsprechenden Ansätzen führen, sollen näher in Zusammenarbeit mit der Uni-Greifswald analysiert werden. Auch Bentonite aus bestimmten Proben sollen hinsichtlich ihrer Schichtladung analysiert werden (Zusammenarbeit mit der Uni Greifswald). Überlegungen hierzu entstanden während des UMB-II Workshops in Hannover. Im Frühjahr 2024 ist eine weitere Beprobung der Mikrokosmen nach etwa 1000 Tagen Inkubation geplant.

### • 5. Berichte, Veröffentlichungen

#### Vorträge:

*Matschiavelli, N., Microbial Influence on Cast Iron Corrosion under Repository-Relevant Conditions*; 6<sup>th</sup> project meeting UMB-II, Hannover, 06.12.2023.

<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:</b> C3: Sicherheitsnachweis; C3.1 Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-)Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.01.2021 bis 31.12.2023	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2023 bis 31.12.2023	
<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

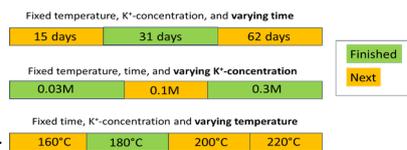
Da unser neuer Techniker erst Anfang 2023 eingestellt wurde, wurden die fehlenden Proben aus allen Batch-Experimenten bearbeitet. Zusätzlich wurde das TEM kalibriert, um die Präzision der EDX-Messungen mit verschiedenen Tonmineralstandards zu erhöhen (Warr et al., eingereicht). Alle Proben wurden mit Ca<sup>2+</sup> ausgetauscht, um die neu gebildeten Illitanteile zu bestimmen. Verschiedene Illit-Polytypen, einschließlich 1M-cv und 1Mtv, wurden durch Elektronenbeugung (SAED) in den neu gebildeten Illitfraktionen beobachtet. Alle Proben wurden SAED-Messungen unterzogen, um die Kristallographie der neu gebildeten Illite zu untersuchen. Wir konzentrierten uns auch auf die Aufnahme hochauflösender Bilder mit dem TEM, um die Reaktionsmechanismen der Smektite zu

verstehen. Alle Eluate der Batch-Reaktorexperimente wurden mit einem Mikrowellenplasma-Atomemissionsspektrometer (MP-AES) analysiert, um die gelösten Kationen zu untersuchen. Nach Abschluss der durchgeführten Batch-Reaktor-Experimente aus AP 3.3, 3.4 und Teile des AP3.5 führen wir mit der Datenanalyse und der Diskussion der Ergebnisse fort. Im Anschluss konnten wir erste Schlussfolgerungen über den Mechanismus der Smektitveränderung machen. Es wurde gezeigt, dass die erhöhte Aktivität von  $K^+$  in den Lösungen und das Vorhandensein von K-Oxalat die Reaktionsgeschwindigkeit deutlich erhöht. Es wurde auch beobachtet, dass Smektite in eine amorphe Phase aufgelöst und dann zu Illiten neugebildet werden. Die Voruntersuchungen ergaben auch, dass sich Smektite nicht kongruent auflösen, indem die Keimbildung und das Wachstum kleiner Kristallite beobachtet wurde..

Da es für das Verständnis der Smektitmechanismen unerlässlich ist, die Kinetik der Reaktionen zu untersuchen, wurde die nächste Reihe von Experimenten konzipiert. Zu diesem Zweck wurden erneut reine Smektitfraktionen hergestellt. Die durchgeführten Experimente zeigten erfolgreich die Smektitveränderung in Anwesenheit von K-Oxalat, so dass der nächste Schwerpunkt darin besteht, die Veränderung von Smektiten in Abhängigkeit der  $K^+$ -Konzentration, der Zeit und der Temperatur zu bestimmen.

#### 4. Geplante Weiterarbeiten

Da weitere Batch-Experimente erforderlich sind, stellen wir derzeit mehr Rohstoffe für neue, bevorstehende Experimente her.



Hannah Gardinier,

Abbildung 1: Projektplan für die kinetischen Untersuchungen

Da das Projekt um weitere 18 Monate verlängert wurde, sind weitere Batch-Reaktorexperimente bei niedrigeren und höheren Temperaturen, unterschiedlichen Zeiten und  $K^+$ -Konzentrationen geplant. Die Ergebnisse sollen dazu dienen, die Reaktionskinetik und die Raten der Smektitumwandlung mit und ohne organischen Katalysatoren so zu bestimmen, dass sie als Vorhersageinstrument verwendet werden können (Abbildung 1). Eine verbesserte Arrhenius-Reaktionsgeschwindigkeitsgleichung, die auf die Bentonitveränderung anwendbar ist, würde unser Verständnis langfristiger Integrität der Barriere in unterirdischen Endlagern erheblich verbessern.

Unsere jüngsten Ergebnisse wurden auf der UMB2-Jahrestagung in Hannover (5./6. Dezember) und auf dem Impulsvortrag BMUV-Projektstatusgespräch 2023 in Karlsruhe vorgestellt.

#### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Sudheer Kumar, R.; Warr, L.; Grathoff, G. & Thombare, B. Experimental smectite alterations in the presence of accessories at 180°C with and without K-oxalate, (Impulsvortrag) BMUV-Projektstatusgespräch 2023, Karlsruhe.

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

<b>Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer:</b> Technische Universität München		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11870D</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbund Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren (UMB) Teilprojekt D: Fe(II)/Fe(III)-Redoxreaktion auf atomarem Niveau in Smektiten		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> C3: Sicherheitsnachweis; C3.1 Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-)Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.01.2021 bis 30.06.2025	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2023 bis 31.12.2023	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 339.641,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. S. Krüger	

## 1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

Vorhabensziele:

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

## 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

Das Untersuchungsprogramm umfasst folgende Arbeitspakete (AP):

4. Methoden und Modelle
5. Fe(II) in Smektiten
6. Fe(II) in und an Smektitoberflächen
7. Zwischenschichtionen in Smektiten
8. Eisenkorrosionsphasen

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

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

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

Quantenmechanische Modellierungen zu oktaedrischen Eisensubstitutionen in Smektiten wurden auf transvakanten Pyrophyllit und Montmorillonit mit bis zu zwei Substitutionen in der  $2 \times 1 \times 1$  Einheitszelle erweitert (AP 2). Smektitmodelle mit einer oktaedrischen Substitution bestätigen in Übereinstimmung mit dem Experiment, dass Fe(III) transvakante und Mg(II) cisvakante Gitter stabilisiert. Für Fe(II) wurde eine geringe Präferenz für das transvakante Gitter gefunden. Für oktaedrisches Fe(II) wurden auch in transvakanten Gittern zwei geometrisch sehr ähnliche Strukturen unterschiedlicher Energie gefunden. Sie weisen dieselbe inverse Proportionalität zwischen dem mittleren Fe-O-Abstand und der Energie auf wie in cisvakanten Strukturen. Der Vergleich cis- und transvakanter Strukturen mit zwei Substitutionen ergab, dass generell transvakante Gitter bevorzugt sind, mit Ausnahme von eisenfreiem Montmorillonit. Die Reduktion von Fe(III) zu Fe(II) führt in ungeladenen Smektitmodellen zur relativen Stabilisierung cisvakanter, in geladenen ( $q = -0.25 e$ ) jedoch transvakanter Gitter. Relative Energien der Eisensubstitutionen in Smektiten in Abhängigkeit ihres Abstandes sind für transvakante und cisvakante ähnlich. Die Variation aufgrund unterschiedlicher Verbrückungen (O,OH) bei gleichem Abstand ist im transvakanten Gitter etwas ausgeprägter. Der Effekt des Gittertyps auf Eisenredoxpotentiale beträgt bis zu 90 mV. Für Smektitmodelle mit zwei Eisensubstitutionen wurde begonnen neben dem antiferromagnetischen auch den ferromagnetischen Spinzustand zu untersuchen. Neben einem merklichen Energieeffekt für benachbarte Substitutionen wurde teils auch eine langreichweitige Spinordnung gefunden, die wohl als Artefakt kleiner, relativ geordneter Modelle anzusehen ist. Mit der Berechnung von Schwingungsfrequenzen zur Berechnung thermodynamischer Korrekturen der Energie wurde begonnen.

Vergleiche relativer Redoxpotentiale wurden auf Smektite unterschiedlicher Ladung erweitert (AP 2). Verglichen wurde die Reduktion von Fe(III) in Modellen mit ein oder zwei Fe-Substitutionen und Schichtladungen von 0 und  $-0.25 e$ . Die Eisenreduktion der Smektite mit negativer Schichtladung erfordert für Fe(III) neben einer negativ geladenen oktaedrischen Substitution mehr Energie als in ungeladenen Smektiten. Bei größerem Abstand der Substitutionen ist überraschenderweise das Gegenteil der Fall. Cisvakante Gitter ungeladener Smektitmodelle sind etwas leichter zu reduzieren als transvakante. Bei geladenen Modellen wurde der entgegengesetzte Trend erhalten. Diese Befunde konnten durch das elektrostatische Potential der Valenzelektronen am Kernort, das den Ausgangszustand der Reduktionsreaktion charakterisiert, im Wesentlichen bestätigt werden.

Neben der formalen Reduktionshalbreaktion  $\text{Sme}(\text{Fe}^{3+}) + e^- + \text{Na}^+(\text{solv}) \rightarrow \text{Sme}(\text{Fe}^{2+}, \text{Na}^+)$  von Fe(III) in Smektiten wurde auf Anregung des Projektpartners BGR begonnen, die Reduktion durch Wasserstoff zu untersuchen (AP 2),  $2 \text{Sme}(\text{Fe}^{3+}) + \text{H}_2 \rightarrow 2 \text{Sme}(\text{Fe}^{2+}, \text{H}^+)$ . Wasserstoff steht in einem Endlager durch Korrosion von Stahl unter reduzierenden Bedingungen zur Verfügung. Am Beispiel wasserfreien Pyrophyllits mit einer Fe(III)-Substitution konnte gezeigt werden, dass  $\text{H}_2$  in der Zwischenschicht in Silikaträngen liegt und um etwa 12 kJ/mol weniger stabil ist als in wässriger Lösung. Das durch Eisenreduktion erzeugte Proton bindet bevorzugt an OH-Gruppen neben Fe(II) und bildet dort einen Wasserliganden, der der erste Schritt einer vorgeschlagenen Dehydratation sein könnte. Diese Arbeiten werden derzeit auf weitere Smektitmodelle ausgedehnt, um den Einfluss von Zusammensetzung, Struktur und Ladung zu charakterisieren.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

AP 1: Modelle und Methoden; AP 2: Fe(II) in Smektiten; AP 4: Zwischenschichtionen 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 30.06.2025	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2023 bis 31.12.2023	
<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 Messreihe zu den definierten Gemischen aus unreaktiertem Fe(0) sowie Tonmineralien mit definiertem Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-Anteil wurde um mehrere Proben erweitert. Es wurde zudem mit der Analyse einer neuen Messreihe begonnen. Zwei der weniger korrosiven Bentonite wurden mit Mineralstandards umgesetzt, um das Verhältnis von reagiertem Produkt/ unreaktiertem Edukt quantifizieren zu können. Der Tieftemperatur-Aufbau wurde in Betrieb genommen.
- AP3: Transimpedanzverstärkerschaltung erzielt simulativ gute Ergebnisse und wurde bereits in Hardware umgesetzt. Aktuell werden Testmessungen durchgeführt. Hardwareseitig wurde die Auswerteeinheit auf die Auslesung von drei Detektoren erweitert. Simulative Neuentwicklung, Analyse und Optimierung der Mössbauer Verstärkerschaltung. Praktische Umsetzung der Neuentwicklung in Form eines ersten prototypischen Schaltungslayouts mit ersten realen Messungen. Erster Durchlauf der Stabilitätsanalyse mit positivem Ergebnis. Entwicklung und Umsetzung einer neuen Stabilitätsnachweismethodik (Erweiterung der Stabilitätsbetrachtung nach Lyapunov).

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1 & AP2: Es sollen weitere Mößbauermessungen für die BGR, das HZDR sowie die Universität Greifwald aufgenommen und ausgewertet werden. Es wird daran gearbeitet, das Problem am Tieftemperaturaufbau zu beheben.
- AP3: Letzte Einheiten der Transimpedanzverstärkerschaltung werden hardwareseitig optimiert und weitere Messungen folgen. Praktische Optimierung der Schaltung in Bezug auf SNR und Reaktionsgeschwindigkeit. Darauf aufbauend weitere Optimierung der Simulationsmodelle. Weitere Messungen in Bezug auf die neue Stabilitätsnachweismethodik.

### 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> <b>02 E 11870F</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt F		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> C3: Sicherheitsnachweis; C3.1 Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-)Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.01.2021 bis 31.12.2023	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2023 bis 31.12.2023	
<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 Umwandlung von Fe-haltigen Schwermineralen und Carbonaten sowie die Gasentstehung in Bentoniten, die durch die Oxidationsreaktionen ausgelöst werden können, wurden mikrotomographisch an einem Synchrotron untersucht. Basierend auf Vorversuchen wurde das Oxidationsmittels H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> eingesetzt, um die Reaktionen zu beschleunigen und eine *in situ* Beobachtung der Veränderungen zu ermöglichen. Die Bildanalyse von einzelnen aufgenommenen Lagen ergibt, dass Schwerminerale und Gasbläschen eindeutig, Carbonate nur eingeschränkt separiert werden können. Bei den Schwermineralen zeigt nur ein kleiner Teil einen schnellen Umsatz. Die Untersuchung der Gasentstehung in zeitlicher Reihung ergibt bei gering verdichtetem Bentonit folgendes Bild: Entstehende Gasbläschen sind im initialen Stadium in Poren zwischen Aggregaten aus Bentonit lokalisiert und zeichnen dabei die unregelmäßigen Formen des Porenraums nach. Mit zunehmender Entgasung wurden die Bläschen größer, wobei ihre Zirkularität ansteigt. Die Gasbläschen üben dabei einen mechanischen Druck auf die Bentonitmatrix

aus, die dabei zusammengepresst wird. Dies führt zu einer Verringerung des Porenanteils. Das dort enthaltene Wasser wird frei und verändert die Wassermensken, die durch Wölbung nach außen ihre kontrahierende Wirkung verlieren. Die damit einhergehende Verminderung der Stabilität begünstigt die Bildung kreisförmiger Formen der Bläschen.

AP2: Um den an die Fe-Freisetzung gebundenen potentiellen Versauerungsbeitrag von in den Bentoniten vorkommenden primären Silicaten und Erzmineralen vergleichend zu bewerten, wurden in einem Druckaufschlusssystem bei 110°C und zum Vergleich bei 20°C Oxidationsversuche durchgeführt, die Lösungsparameter pH und elektrische Leitfähigkeit bestimmt und die freigesetzten Mengen an Fe, Al, Mn und Si in der überstehenden Lösung sowie durch Extraktion der Festphase mit Dithionit-Citrat-Bicarbonat (DCB) bestimmt. Die hohe Reaktivität von Sulfidmineralen wurde hier bestätigt und im Vergleich auch ein deutlicher Beitrag des verbreitet auftretenden oxidischen Schwerminerals Magnetit, mehr untergeordnet auch von Ilmenit und Silicaten festgestellt.

AP3: Keine Arbeiten im Berichtszeitraum.

AP4: Vom HZDR wurden 60 Tonproben für die Quantifizierung des Korrosionsumsatzes der Fe-Plättchen in verschiedenen Mikrokosmenversuchen erhalten. Hierfür wurde DCB-lösliches Fe, Al, Mn und Si aus den Tonproben extrahiert und am ICP-OES quantifiziert. Es konnte festgestellt werden, dass dieses Extraktionsmittel den Umfang der Korrosion der Plättchen über die in Lösung gebrachten Fe- und Mn-Mengen sehr gut quantitativ wiedergibt. Der Transfer dieser Elemente vom Plättchen in den umgebenden Ton ist umfangreich. Zum Teil wurden mehr als 50 Gew.% Fe im Ton erhalten. Während extrahiertes Fe und Mn korreliert ist, liegen für die Konzentrationen an extrahiertem Al und Si, markant feststellbar, Obergrenzen vor. Für Al hängt die Freisetzung mit der reduktiven Auflösung von Montmorillonit zusammen während für das aus den Plättchen freigesetzte Si die in Lösung befindliche Menge vermutlich durch die Bildung einer sekundären Festphase begrenzt wird.

AP5: Um die chemischen und strukturellen Veränderungen an Kantenflächen durch Anreicherung/Adsorption von Fe mittels XPS zu kennzeichnen wurden entsprechende Lösungs- und Belegungsbehandlungen an Glimmermineralen durchgeführt.

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

AP1: Auswertung der tomographischen *ex* und *in situ* Aufnahmen hinsichtlich Mineralumsatz und Gasentwicklung, Untersuchung der Mikromorphologie der Gasentwicklung bei mittel und stark verdichteten Bentoniten.

AP2: Untersuchung der Versauerungsreaktion mit anschließender DCB-Extraktion an der leichten bzw. schweren Dichtefraktion der Bentonite zur Kennzeichnung des Beitrages von Tonmineralen gegenüber dem von Schwermineralen. Manuskripterstellung.

AP4: Weiterführung der Rauigkeitsuntersuchungen an vom HZDR erhaltenen Fe-Plättchen in der Zeitreihe zur Kennzeichnung der Mikromorphologie der Korrosion. Untersuchung der Veränderung der Oberflächenladung und Matrixstabilität der Tone durch umfangreichen Fe-Transfer von Plättchen in den Ton. DCB-Extraktion an Tonproben an 1-2 weitere Zeitstufen der HZDR Versuchsreihe. Modellversuche zur Al-Freisetzung aus Montmorillonit bei der reduktiven Auflösung.

AP5: Chemische und strukturelle Untersuchung der Kantenflächen mittels XPS

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

Im diesem Berichtszeitraum wurden keine Publikationen veröffentlicht.

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11880</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Sicherheitsrelevante Untersuchungen zur Bentonitaufsättigung (SIRUB)		
<b>Zuordnung zum FuE-Förderprogramm:</b> C2.3: Geotechnische und technische Barrieren		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.04.2021 bis 30.09.2025	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2023 bis 31.12.2023	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 1.356.372,00 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 (BMWA), GRS-199)

b) Wie quillt Bentonit in einen begrenzt freien Raum?

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

c) Können Einheitsisothermen aus Montmorillonitgehalt und Kationentyp abgeleitet werden?

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

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

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

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

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

## 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

Bei der Durchführung des Vorhabens werden folgende Arbeitspakete bearbeitet:

AP 1: Vorbereitende Arbeiten

AP 2: Aufsättigung am Bentonit-Wasser-Kontakt

AP 3: Begrenzt freie Quellung

AP 4: Einheitsisothermen

AP 5: Endporosität nach der Aufsättigung über Dampf

AP 6: Interaktion von Grundwasser und Bentonit im Kristallin

AP 7: Erstellung des Abschlussberichts

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Zu AP1: Das bestellte Spektrometer wurde mit Verzögerung geliefert. In ersten Messungen wurde die Eignung von unterschiedlichen Gläsern für das Beobachtungsfenster der Messzelle geprüft.

Zu AP 4: Der Vergleich zwischen den gemessenen Adsorptions- und Desorptionsisothermen und den auf der Basis von Einheitsisothermen skalierten Kurven wurde auf der EUROCLAY2023 präsentiert. Eine Ursache für die wenigen Fälle, bei denen dabei keine plausible Übereinstimmung gefunden wurde, könnte ein signifikanter Anteil Mg-Ionen an den Zwischenschichtionen sein. Aus diesem Grund sollen Isothermen für einen Mg-Bentonit aufgenommen werden. Einen solchen könnte BGR zur Verfügung stellen. Zu diesen Messungen ist es jedoch noch nicht gekommen, weil sich die Wartung des dazu erforderlichen Messgeräts seit Monaten verzögert.

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

Zu AP6: Die zeitaufwendige Verarbeitung der aufgenommenen Klufdaten wurde fortgesetzt und ein erster druckfähiger Datensatz konnte erzeugt werden. Vorversuche mit der gedruckten Einzelkluft wurden durchgeführt, um unterschiedliche Dichtkonzepte für die geplante Messzelle zu testen. Nach der erfolgreichen Durchführung der Vorversuche wurde mit dem Bau der Messzelle begonnen.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Vergrößerung des Messabstands zwischen Spektrometersonde und Probe durch Linsensystem (AP1)
- Beginn der Aufsättigungsversuche (AP2 und AP3)
- Fortsetzung der Arbeiten zur Isothermenbestimmung für einen Mg-Bentonit (AP4)
- Fortsetzung der Aufsättigungsversuche über Dampf und Wasser (AP5)
- Scannen der übrigen Granitproben aus dem HRL Äspö (AP6)
- Fertigstellung der Messzelle sowie Durchführung erster Versuche (AP6)

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Das Projekt SIRUB wurde beim PTKA Projektstatusgespräch zu BMUV-geförderten FuE-Projekten zur Entsorgung radioaktiver Abfälle am 6./7. November 2023 in Karlsruhe vorgestellt.

<b>Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer:</b> BGE TECHNOLOGY GmbH		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11890A</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Entwicklung und Test eines erweiterten Hoek-Brown Stoffmodells zur Berücksichtigung anisotropem Festigkeitsverhaltens bei der Anwendung der Integritätskriterien für kristalline Wirtsgesteine		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> C3: Sicherheitsnachweis C3.1 Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-)Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.03.2021 bis 31.10.2024	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2023 bis 31.12.2023	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 393.063,82 EUR	<b>Projektleiter:</b> R. Paola León Vargas	

## 1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

## 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

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

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

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im Berichtszeitraum wurden im Rahmen des Arbeitspakets 3 (AP3) signifikante Fortschritte bei der Implementierung des Stoffmodells BARIK sowohl in FLAC3D als auch in OpenGeoSys (OGS) erzielt. Im Computercode FLAC3D wurde auf Basis der bereits getesteten Matriceigenschaften zusätzlich eine Formulierung für Schwächeflächen implementiert. Vorherige Testmodelle wurden mit dieser neuen Version der Dynamic Link Library (DLL) Neuberechnet. Als Vergleichsbasis dienten bereits in FLAC3D implementierte Stoffmodelle wie Ubiquitus-Joint und Hoek-Brown-PAC.

Die Entwicklungsarbeit am BARIK-Stoffmodell für OpenGeoSys mittels MFront wurde kontinuierlich vorangetrieben. Nachdem Unstimmigkeiten in den Ergebnissen einiger Testberechnungen festgestellt wurden, erfolgte eine sorgfältige Überprüfung der Kompilierung in OGS. Diese Schritte erforderten erheblichen Zeitaufwand, da eine Überprüfung jedes einzelnen Schritts notwendig war. Mehrere Skriptfehler wurden identifiziert und konnten im Berichtszeitraum behoben werden. Hierfür war eine detaillierte Analyse der Fehlermeldungen und ein Verständnis der Ursachen in der sich dynamisch ändernden Code-Struktur von OGS und der entsprechenden MFront-Version erforderlich.

Als zusätzlicher Schritt zur Verifizierung der Implementierung des BARIK-Stoffmodells in FLAC3D und OpenGeoSys wurden Benchmark-Übungen mit beiden Codes durchgeführt. Die Ergebnisse bestätigten die erfolgreiche Implementierung in FLAC3D. Die Ergebnisse aus OGS zeigten, dass die Fehlerbehebung nahezu vollständig abgeschlossen wurde.

Die Verifizierungs- und Validierungsrechnungen wurde daraufhin ausgeweitet.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- AP 3 und AP4: Fortführung der Validierungsrechnungen mit FLAC3D.
- AP 3: Integration der Schwächefläche in die erste verifizierte Stufe des BARIK-Stoffmodells mittels MFront für OpenGeoSys.
- AP 4: Erste Anwendungsanalysen des BARIK-Stoffmodells zur Überprüfung des Dilatanzkriteriums.
- AP 5: Detaillierte Dokumentation der Verifizierungs- und Validierungsrechnungen für das BARIK-Stoffmodell unter Verwendung von FLAC3D und OpenGeoSys.
- Austausch mit der BGR im Rahmen eines Treffens in Freiberg

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

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

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

Friedel, M. & León Vargas, R. (2023): BARIK - Ein erweiterter Ansatz zur Berücksichtigung des anisotropen Deformations- und Festigkeitsverhaltens und Ableitung von Integritätskriterien für kristalline Wirtsgesteine. In: M. Stacheder; M. Bühler & S. Mohr (Hrsg.) Projektstatusgespräch 2023 zu BMUV-geförderten FuE-Projekten zur Entsorgung radioaktiver Abfälle, Karlsruhe, 06. - 07.11.2023. Karlsruhe: Karlsruher Institut für Technologie (KIT)

<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> C3: Sicherheitsnachweis C3.1 Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-)Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.03.2021 bis 31.10.2024	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2023 bis 31.12.2023	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 294.776,55 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr.-Ing. habil. Heinz Konietzky	

## 1. Vorhabensziele

Das Projekt beinhaltet die Entwicklung eines nichtlinearen elasto-plastischen Stoffgesetzes für die kristalline Matrix mit zuzüglich bis zu drei Schwächeflächen. Berücksichtigt werden weiterhin Erweichungsfunktionen für den Nachbruchbereich sowie eine hydraulische Kopplung in Form einer 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

Weitere Verifizierungsrechnungen und Tests zum Stoffgesetz mit Implementierung von bis zu drei Schwächeflächensystemen auf Basis des Ubiquitous-Joint-Ansatzes. Ersetzen des Konzepts zur Ermittlung der äquivalenten Schwächeflächenparameter aus der komplexen orthotropen Elastizitätsmatrix des Gesteins. Dieser Ansatz erwies sich bei transversal-isotropen und orthotropen Verifizierungsrechnungen als nicht zielführend, da die plastische Korrektur in der Ebene der Schwächefläche nicht korrekt durchgeführt wurde. Nun Verwendung des COMBA-Modell-Ansatzes (Built-In-Modell aus FLAC3D 9) zur plastischen Korrektur bei Schwächeflächenversagen.

Verifizierungsrechnungen zum Versagen eines Schwächeflächensystems bei isotrop-elastischer, transversal-isotrop-elastischer und orthotrop-elastischer Gesteinsmatrix mittels UCS-Tests (Druckbelastung und teilweise Zugbelastung) simuliert, dabei wurde das Festigkeits- und Deformationsverhalten untersucht. Die Verifizierungen verliefen mit relativen Fehlern von maximal 2 – 4 % erfolgreich, stellenweise sind sie noch in der Plausibilitätsprüfung. Zukünftig ist eine Erweiterung der orthotropen Verifizierungsrechnungen und ein umfangreicherer Vergleich zum Modellergebnissen mit dem COMBA-Modell geplant. Beginn/Erarbeitung der Durchführung von realitätsnahen Vergleichsrechnungen mit dem COMBA-Modell. Erstellung einer Kurzzusammenfassung von Unterschieden zwischen dem COMBA- und BARIK-Modell.

Simulation eines Laborversuchs (UCS-Tests) hinsichtlich der einaxialen Druckfestigkeit in Abhängigkeit von der Matrix- und Schwächeflächenorientierung unter Berücksichtigung von Matrix- (Hoek-Brown) und Schwächeflächenversagen (Ubiquitous-Joint).

Weiterführung der hydro-mechanisch gekoppelten Triaxialversuche sowie Planung der erweiterten einaxialen Versuche an speziell hergestellten Prüfkörpern mit diskreten Trennflächen.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Weitere Verifizierungen des Schwächeflächenverhaltens und Vergleichsrechnungen mit dem COMBA-Modell der Firma Itasca.
- Implementierung und Verifizierung eines Algorithmus zur Versagensabfrage/-entscheidung für die Durchführung der plastischen Korrektur entweder auf Basis eines Schwächeflächensystems oder der Matrix.
- Implementierung der Softening-Funktionen
- Implementierung der hydro-mechanischen Kopplung
- Beendigung der hydro-mechanisch gekoppelten Triaxialversuche sowie die Auswertung dieser
- Erstellung der Proben mit diskreten Schwächeflächen und Beginn der Durchführung der einaxialen Druckversuche

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

- Postervorstellung des Projektes auf der Konferenz SafeND 2023 in Berlin
- 06.-07.11.2023 Vortrag bei Projektstatusgespräch des Projektträgers PTKA in Karlsruhe

<b>Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer:</b> BGE TECHNOLOGY GmbH		<b>Förderkennzeichen:</b> 02 E 11900
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Langzeitsicherheit von Verschlussystemen in Schächten und Rampen im Vergleich (LARYSSA)		
<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> 01.07.2023 bis 31.07.2023	
<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**

AP5: Die erarbeiteten Projektergebnisse wurden in einem zusammenfassenden Abschlussbericht dokumentiert. Das Projekt endete zum 31.07.2023.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

keine

### **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 30.11.2024	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2023 bis 31.12.2023	
<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 Simulationsrechnungen, die auf den bisherigen numerischen Arbeiten zur Transportheterogenität auf Klufflächen im Granit von Soultz-sous-Forêts basieren, wurden im Berichtszeitraum abgeschlossen. Ein numerisches Verfahren zur Quantifizierung der Fließratendifferenzen und Fließratenbeschleunigungen aus Simulationsrechnungen wurde entwickelt und getestet. Generalisierbare Schlussfolgerungen zum Modelldesign von Transportmodellierungen wurden daraus abgeleitet. Ein Manuskript zu diesen inhaltlichen Schwerpunkten wurde vorbereitet und wird zur Veröffentlichung eingereicht.

Ein Datensatz zur Oberflächenreaktivität bei Kristallauflösung (Materialanalog für Kluffüllungen) wurde statistisch ausgewertet, unter Verwendung des im ersten Halbjahr 2023 entwickelten *power spectral density*- (PSD-)Ansatzes. Die PSD-Daten wurden mit Ratenpektrendaten der Kristallauflösung verglichen. Ziel ist es, aus weiterer statistischer Analyse dieser umfangreichen Datensätze generalisierbare Zusammenhänge zwischen Oberflächenreaktivität und Nanotopografie zu erfassen und daraus Parametrisierungen für reaktive Transportmodelle abzuleiten. Aktuell werden diese Datensätze weiter ausgewertet.

Die Auswertung der CT-Daten aus Olkiluoto wurde abgeschlossen. Positronen-Emissions-Tomografie- (PET-)Messungen der Fließpfade auf Klüften wurden ausgewertet und liegen zur weiteren Verwendung vor.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Die statistischen Arbeiten Ratenkarten und PSD-Analysen der Calcit-Oberflächen sollen demnächst abgeschlossen werden, ein Manuskript dazu ist derzeit in der Konzeption und soll erstellt werden.

Simulationsrechnungen auf den Kluffgeometrien von Olkiluoto sind geplant und sollen mit den Durchbruchskurven von Soultz-sous-Forêts verglichen werden. Vergleiche der Transportmodellierungen mit den PET-Datensätzen bzgl. der hydrodynamischen Parameter sind geplant. Quantitative Unterschiede der Fließmuster in den unterschiedlich mineralisierten Klüften werden analysiert und mechanistische Schlussfolgerungen gezogen.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

- W Zhou, C Fischer (2023): 3D modeling of solute transport through natural fractures with micro-rough walls in crystalline host rocks: The effects of asperities and surface characteristics on hydrodynamics, Interpore German Chapter meeting, 13–14 Sept 2023, KU Eichstätt-Ingolstadt 2023 (**Vortrag**)
- Fischer, C. (2023): Reactive transport processes revealed by tomographic analysis 10th Granada-Münster Discussion Meeting on fluid-mineral interactions, 29.11.-1.12. 2023, Münster, Deutschland (**Vortrag**)
- Fischer, C (2023): Reactive transport in porous materials: current trends and challenges  
HZDR Science conference, 12.11.-13.11.2023, Rossendorf, Deutschland (**Vortrag**)

<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-Programm:</b> C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte; Endlagertechnik und (geo-)technische Barrieren, C2.3 Geotechnische und technische Barrieren		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.04.2021 bis 31.11.2024	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2023 bis 31.12.2023	
<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 Proben des Zwei-Glimmer-Granodiorits (Oberottendorf) und seiner Ganggesteine wurden mineralogisch und geochemisch untersucht. Weiterhin zeigte sich innerhalb der Lamprophyre große Variabilität sowohl in Bezug auf chemische/mineralogische Zusammensetzung. Anhand von Proben des Lausitzer Granodiorits (Königsbrück) wurde die Konnektivität der Porenraums skalenübergreifend verglichen (REM, N<sub>2</sub>-Pyknometrie, Polarisationsmikroskopie). Im Fokus standen von Klüften ausgehende Alterationen, dies sich durch Fe-Hydroxide und Serizitisierung der Feldspäte auszeichnen. Die Datensätze wurden um BET-Oberflächenanalysen und H<sub>2</sub>O-, bzw. N<sub>2</sub>-Sorptionisothermen ergänzt. Dabei zeigte sich, dass die Zunahme der verbundenen Porosität im Alterationssaum gegenüber dem frischem Gestein skalenübergreifend nachweisbar ist. Zur Überprüfung der Hypothese wurden weitere Bohrkern Scans mittels  $\mu$ CT durchgeführt und die Bohrkern für Gas-Pycnometer und zusätzliche BET und H<sub>2</sub>O-Sorptionmessungen vorbereitet.

**AP2:** Die Sorptionsversuche wurden vorerst abgeschlossen. Dabei wurde nicht das erwartete Ergebnis einer deutlich erkennbaren Sorptionskurve erzielt. Die Daten zeigen, dass trotz Konditionierung der Proben die Lösungsprozesse aus dem Gestein teilweise die Tracer-Sorption (REE, U, Th, bzw. Cs, Eu, Hf) überlagern. Dies ist möglicherweise auf die Probenkonditionierung zurückzuführen. Die Daten werden derzeit überprüft und das experimentelle Design wird überarbeitet. In Vorbereitung dazu wurden Lösungsexperimente mit Proben des Zwei-Glimmer-Granodiorits (Oberottendorf) und den dort entnommenen Lamprophyren durchgeführt.

**AP4:** Zwischen den Doktoranden hat sich ein regelmäßiger Austausch (1-2x pro Monat) über den aktuellen Arbeitsfortschritt etabliert. Außerdem konnte durch die Teilnahme am RENA Workshop zum Thema Scientific Writing und am anschließenden Remediation Colloquium der Austausch mit Doktoranden aus der Endlager Community intensiviert werden. Aktuelle Arbeiten wurden durch einen Posterbeitrag bei der MIGRATION Conference in Nantes durch die Doktorandin Annemie Kusturica sowie PI Thorsten Schäfer vorgestellt. Im Rahmen des Projektträgerstatusgesprächs im November 2023 wurde das Verbundvorhaben WTZ-Granit vorgestellt. Durch die Teilnahme an einem einwöchigen Feldkurs in der Grimsel Test Site (GTS, Schweiz) und die anschließende Unterstützung bei der Probenanalyse durch die Doktorandin konnten überregional Erfahrungen mit endlagerrelevanten kristallinen Systemen gesammelt werden.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

**AP 1, 2 & 3:** Die Optimierung von Ablationsparametern und die Durchführung orts aufgelöster Sorptionsexperimente wird weiterhin als Ziel definiert. Gleichzeitig soll überprüft werden, ob die beobachteten Alterationen und sekundären Mineralphasen bspw. innerhalb der Biotit-Knickbänder oder entlang von Entmischungslamellen, bzw. im Mineralkern einzelner Feldspäte für rezente Migrationspfade zur Verfügung stehen. Die Segmentierung der  $\mu$ CT Scans soll mittel AI-gestützter Software überprüft werden, um die Differenzierung von Feldspatgruppen innerhalb der Grauwertbereiche voranzutreiben.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

- **veröffentlicht:** Kusturica, A., van Laaten, N., Drake, H. and Schäfer, T. (2022) LA-ICP-MS analysis of trace and rare-earth element distribution in calcite fracture fillings from Forsmark, Simpevarp and Laxemar (Sweden). *Environmental Earth Sciences* 81, 371.
- **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  $\mu$ CT and geochemical and mineralogical analysis. *Int. J. Rock Mech. Min. Sci.*

<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 AMeridium aus hochradioaktiven Abfalllösungen (SEPAM), Teilprojekt A		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> B Forschung zur verlängerten Zwischenlagerung und Behandlung hochradioaktiver Abfälle B2 Abfallbehandlungs- und Konditionierungsoptionen für die Endlagerung		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.04.2021 bis 30.09.2024	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2023 bis 31.12.2023	
<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 AMeridium aus hochradioaktiven Abfalllösungen (SEPAM)“ ist die wissenschaftliche Untersuchung und Weiterentwicklung von Extraktionsprozessen sowie der grundlegenden Chemie zur Abtrennung von Americium aus hochradioaktiven Abfällen. Ein weiterer wesentlicher Aspekt des Projektes ist die Ausbildung und Förderung des wissenschaftlichen Nachwuchses im Bereich der Nuklearen Sicherheitsforschung und Nuklearchemie im Allgemeinen und in Themen der Actinidenchemie im Besonderen. Durch eine internationale Ausrichtung des Projekts werden aktuelle Entwicklungen im Ausland berücksichtigt. Somit leistet das Projekt einen wichtigen Beitrag zum Aufbau, der Weiterentwicklung und dem Erhalt wissenschaftlich-technischer Kompetenz in der nuklearen Sicherheitsforschung.

## 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

Das Projekt wird in vier Arbeitspaketen bearbeitet:

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

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

#### *Arbeitspaket 1:*

BTP-(COOH)<sub>8</sub>, 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 Abtrennfaktoren 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.

UV-Vis-Messungen wurden mit verschiedenen Methoden durchgeführt, um den pKa des Moleküls zu bestimmen. Der erste Schritt bestand darin, den Liganden in 0,1 mol L<sup>-1</sup>, HClO<sub>4</sub> und NaOH aufzulösen und eine Endkonzentration von 1×10<sup>-5</sup> mol L<sup>-1</sup> zu erreichen, um das Verhalten des Liganden in beiden Punkten der pH-Skala zu kennen. Anschließend wurde mit dem sauren pH-Wert getestet und schrittweise durch Zugabe von NaOH erhöht, wobei die Ligandenkonzentration leicht reduziert wurde. Die Alternative bestand darin, Lösungen mit unterschiedlichen pH-Werten herzustellen, um die Konzentration des Liganden konstant zu halten. Unter Berücksichtigung der Ionenstärke wurden alle Verbindungen in 0,1 mol L<sup>-1</sup> NaClO<sub>4</sub> gelöst. Ein anderer Ansatz war die Verwendung von Puffern, z.B. Ammoniumacetat/Essigsäure. Die getesteten Methoden führten zu unterschiedlichen Werten. Daher werden die Ergebnisse evaluiert und weitere Bestimmungen des pKa Werts vorgenommen.

#### *Arbeitspaket 2:*

Die Stabilität von BTP-(COOH)<sub>8</sub> gegenüber HNO<sub>3</sub> wird in Hydrolyseexperimenten untersucht. Dazu wird in regelmäßigen Abständen beobachtet, wie sich die Extraktionsfähigkeit des BTP-(COOH)<sub>8</sub> im Laufe der Zeit verändert, wenn es in Salpetersäure gelöst wird. Dazu wurde der Ligand in verschiedenen Konzentrationen von HNO<sub>3</sub> gelöst, und wird gegen TODGA in ISANE IP-Lösung getestet. Eine erste Extraktionsreihe als Referenz wurde gleich nach Herstellung der Lösungen durchgeführt. Weitere Extraktionen werden im Abstand mehrerer Wochen durchgeführt, und die Ergebnisse mit der Referenz verglichen, um die Hydrolysestabilität des Liganden zu evaluieren.

#### *Arbeitspaket 3:*

Um die Charakterisierung des Liganden neben den TRLFS-Messungen fortzusetzen, wurden kinetische Extraktionsexperimente für ein, fünf, zehn, fünfzehn, dreißig und sechzig Minuten getestet und festgestellt, dass die Komplexbildung mit An(III) in weniger als 5 Minuten ihr Maximum erreichte. Das Experiment wurde für die Extraktion und die Rückextraktion durchgeführt, um bessere Verteilungsverhältnisse für den Extraktionsschritt zu finden.

#### *Arbeitspaket 4:*

Die Doktorandin hat an verschiedenen Projekttreffen und der Online-Konferenz „Nuclear Fuel Cycle: A Chemistry Conference (NFC3)“ teilgenommen und ihre neuesten Ergebnisse vorgestellt.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Die Bestimmung des pKa-Werts von BTP-(COOH)<sub>8</sub>, BTBP-(COOH)<sub>8</sub> und BTPPhen-(COOH)<sub>8</sub> mittels potentiometrischer Titration wird fortgesetzt. Die Komplexbildungseigenschaften der Liganden werden temperaturabhängig untersucht.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Diaz Gomez, L. J.; Weßling, P.; Wilden, A.; Panak, P.; Modolo, G.; Geist, A. Preliminary Studies on Extraction and Characterisation of Water-Soluble Octa Carboxylic Acid for the Separation of Trivalent Actinides, Nuclear Fuel Cycle: A Chemistry Conference (NFC3), Online, 15.-16.11.2023, Vortrag.

<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 AMeridium aus hochradioaktiven Abfalllösungen (SEPAM) Teilprojekt B: Thermodynamische Daten und Spektroskopische Untersuchungen		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> B Forschung zur verlängerten Zwischenlagerung und Behandlung hochradioaktiver Abfälle B2 Abfallbehandlungs- und Konditionierungsoptionen für die Endlagerung		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.04.2021 bis 30.09.2024	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2023 bis 31.12.2023	
<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 AMeridium aus hochradioaktiven Abfalllösungen (SEPAM)“ ist die wissenschaftliche Untersuchung und Weiterentwicklung von Extraktionsprozessen sowie der grundlegenden Chemie zur Abtrennung von Americium aus hochradioaktiven Abfällen. Ein weiterer wesentlicher Aspekt des Projektes ist die Ausbildung und Förderung des wissenschaftlichen Nachwuchses im Bereich der Nuklearen Sicherheitsforschung und Nuklearchemie im Allgemeinen und in Themen der Actinidenchemie im Besonderen. Durch eine internationale Ausrichtung Projekts werden aktuelle Entwicklungen im Ausland berücksichtigt. Somit leistet das Projekt einen wichtigen Beitrag zum Aufbau, der Weiterentwicklung und dem Erhalt wissenschaftlich-technischer Kompetenz in der nuklearen Sicherheitsforschung.

## 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

### *Arbeitspaket 1:*

Grundlagen Koordinations- und Extraktionschemie

### *Arbeitspaket 2:*

Prozessrelevante Optimierungen

### *Arbeitspaket 3:*

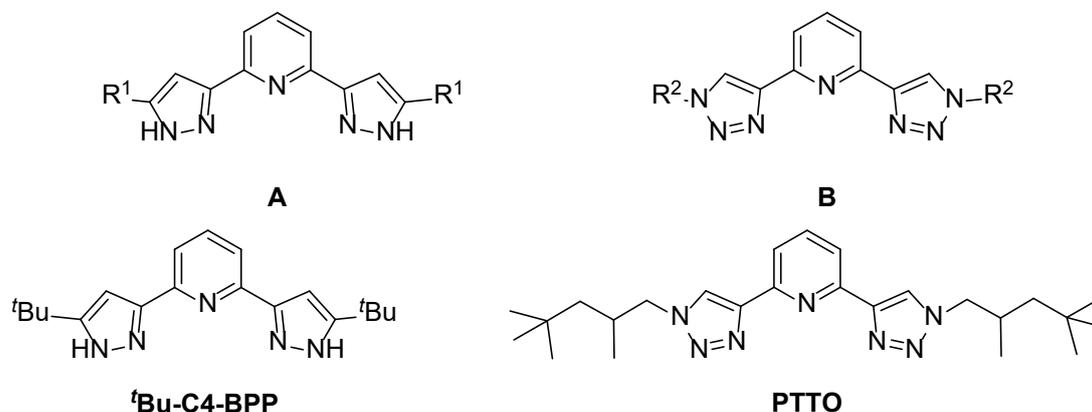
Modellierung und Prozesstests

### *Arbeitspaket 4:*

Nachwuchsförderung

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

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



Bei vorangegangenen Untersuchungen mittels TRLFS zur Komplexierung von Eu(III) mit <sup>t</sup>Bu-C4-BPP zeigten sich Unterschiede zwischen den in der Titration (in Methanol + 1,5 %<sub>vol.</sub> Wasser) beobachteten Komplexen und der in der organischen Phase eines Extraktions-experiments (<sup>t</sup>Bu-C4-BPP + 2-Bromhexansäure in Kerosin/1-Octanol) beobachteten Spezies. Daher wurden Titrationsversuche in Anwesenheit von 2-Bromhexansäure durchgeführt. Bei der Komplexierung von Eu(III) mit <sup>t</sup>Bu-C4-BPP (in Methanol + 1,5 %<sub>vol.</sub> Wasser + 2-Bromhexansäure) wurden ein 1:1- und ein 1:2-Komplex nachgewiesen. Der 1:1-Komplex (mit Emissionsmaxima bei 592,0 nm und 617,6 nm) bildet sich bereits bei einer BPP-Konzentration von  $5,0 \cdot 10^{-7}$  mol/L. Ab  $1,0 \cdot 10^{-4}$  mol/L bildet sich der 1:2-Komplex. Dessen Emissionsspektrum zeigt eine gute Übereinstimmung mit dem der bei Extraktionsversuchen gefundenen Spezies. Ein 1:3-Komplex konnte nicht beobachtet werden. Es wurden folgende konditionalen Stabilitätskonstanten bestimmt:  $\lg \beta_1' = 4,8$  und  $\lg \beta_2' = 7,3$ . Für beide Spezies konnte keine signifikante Kinetik beobachtet werden.

Weiterhin wurde die Komplexierung von Eu(III) mit PTTO (in Methanol + 5,0 %<sub>vol.</sub> Wasser + 0,01 mol/L HClO<sub>4</sub>) mittels TRLFS untersucht. Es wurde die Bildung eines 1:1-Komplexes (Emissionsmaxima bei 592,9 nm und 618,1 nm) beobachtet, der bei  $4,0 \cdot 10^{-5}$  mol/L PTTO mit 30 % seinen höchsten Anteil aufweist. Ab  $1,0 \cdot 10^{-5}$  mol/L PTTO wurde ein 1:3-Komplex (Emissionsmaxima bei 594,8 nm und 617,6 nm) beobachtet. Ein 1:2-Komplex wurde nicht gefunden. Die konditionalen Stabilitätskonstanten des 1:1- und des 1:3-Komplexes betragen  $\lg \beta_1' = 4,2$  und  $\lg \beta_3' = 12,8$ . Die Lebensdauer von  $(3904 \pm 195)$   $\mu$ s untermauert die Existenz des 1:3-Komplexes.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

#### Arbeitspaket 1:

Die Untersuchung der Komplexierung von Ln(III) und Am(III) mit PTTO mittels NMR.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<b>Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer:</b> Rheinisch-Westfälische Technische Hochschule Aachen		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11931</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Einfluss der thermischen Reife auf die gekoppelten hydro-mechanischen Eigenschaften niedrig-durchlässiger Tonsteine – Feld & Laborskala (Maturity)		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> C1: Standortauswahl, C1.2 Charakterisierung des Geosystems und Geosynthese		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.07.2021 bis 30.06.2025	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2023 bis 31.12.2023	
<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. Die Region 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

Mittlerweile sind die Bohr- und Loggingarbeiten sowie die ersten hydraulischen Tests an allen fünf Lokationen erfolgreich abgeschlossen. Die Stratigraphie und thermische Reife der Bohrungen wurden bestimmt. Die Ergebnisse zeigen, dass der Zielhorizont, das Pliensbachium, an allen Lokationen erfolgreich in der gewünschten thermischen Reife angetroffen wurde.

Es wurde begonnen, die verschiedenen Logs zu analysieren. Anhand der *acoustic-televIEWer*-Logs wurden Kluft- und Rissorientierungen statistisch eingeordnet. An Lokationen 1,3 und 5 wurde mittels der natürlichen und spektralen *Gamma*-Logs die relative mineralogische Zusammensetzung ermittelt sowie mittels des *gamma-density*-Logs und des *Sonic*-Logs die dynamischen elastischen Eigenschaften bestimmt. Die kurzzeitigen hydraulischen Tests wurden in Bohrlokationen 2 und 4 in unterschiedlichen Packer-Intervallen durchgeführt, um eine erste Einordnung der Leitfähigkeit zu erhalten. In Lokationen 1,3 und 5 folgten permanente Bohrlochausbauten für die Langzeittests und Beobachtungen der hydraulischen Eigenschaften. An diesen Standorten wurde mit Puls-Wasserentnahme-Tests begonnen, um die hydraulische Kommunikation zwischen den Doppelbohrungen zu untersuchen.

Im Rahmen der Laborarbeiten wurde die geochemische Charakterisierung aller Bohrungen (1 m Auflösung) abgeschlossen.

Die mineralogische Charakterisierung der Bohrkerne mittels Röntgendiffraktometrie wurde für alle Bohrlokationen abgeschlossen. Zusätzlich wurden für die Lokationen 2, 4 und 5 Untersuchungen zur Kationenaustauschkapazität durchgeführt.

Die Charakterisierung des Porenraums mittels Helium-Pyknometrie und Stickstoffadsorption wurde bereits vollständig für die Bohrlokationen 2, 4 und 5 abgeschlossen. Zudem erfolgten erste Untersuchungen hinsichtlich der Transporteigenschaften für die Lokation 2. Dazu wurden Permeabilitätsmessungen mit Wasser bei einem niedrigen Umgebungsdruck von ungefähr 1 MPa in 10-Meter-Intervallen durchgeführt. Die Messungen erfolgten sowohl parallel als auch senkrecht zur Schichtung. Zusätzlich wurden erste Messungen zur Bestimmung stressabhängiger Permeabilitäten bis zu einem Druck von 30 MPa (sowohl beim Beladen als auch beim Entladen) durchgeführt. Des Weiteren wurde Kapillareigenschaften und die effektive Wasserstoffpermeabilität mittels Wassersperrdruckversuchen untersucht.

Begleitend zu den übrigen petrophysikalischen Tests wurde die Bestimmung der Wasseraufnahme bzw. Abgabefähigkeit zur Charakterisierung des Wasserrückhaltevermögens an Probenmaterial der Bohrlokation 2, 4 und 5 durchgeführt.

Die mechanischen und hydro-mechanischen Eigenschaften wurden für die Bohrlokationen 1, 2, 4 und 5 durchgeführt. Die Tests zur Bestimmung der Festigkeiten wurden dabei sowohl unter uniaxialen als auch den triaxial Druckbedingungen durchgeführt, bei denen die maximale Spannung parallel zu Schichtung aufgebracht wurde. Die einaxiale Druckfestigkeit wurde dabei in Abhängigkeit der Saugspannung untersucht, indem die Proben zuvor bei acht unterschiedlichen Feuchtegraden equilibriert wurden.

Die triaxialen Tests wurden unter voll gesättigten und konsolidierten Bedingungen bei einer effektiven Einspannung von 4 MPa durchgeführt. Es konnten Steifigkeiten, Spitzen- und Residualfestigkeiten bestimmt sowie die poroelastischen Eigenschaften in Abhängigkeit der Versenkungstiefe gesetzt werden.

Somit konnten die Arbeitspakete 1 und 3 erfolgreich abgeschlossen werden und die Bearbeitung der Arbeitspakete 2 und 4 wurde begonnen.

Der Projektstand und die Zwischenergebnisse wurden sowohl der BGE (Bundesgesellschaft für Endlagerung), die das Projekt co-finanziert, im Rahmen einer Vor-Ort-Besprechung am 27.09.2023 als auch im Rahmen des Projektaustauschgesprächs des BMUV am 06.11.2023 vorgestellt.

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

In den folgenden Monaten werden die geochemischen und mineralogischen Messungen abgeschlossen und die petrophysikalischen und geomechanischen sowie hydro-mechanischen Messungen an den Bohrkernen fortgeführt.

Mit der Vervollständigung des petrophysikalischen und geomechanischen Datensatzes können im Laufe des Jahres 2024 erste Korrelationen zwischen physikalischen Gesteinseigenschaften und thermischer Reife herausgearbeitet werden.

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

- Burnaz L., Littke R., Erbacher J., Strauss H., Grohmann S., Amann F., 2024 (akzeptiert). Lower Jurassic (Pliensbachian-Toarcian) marine paleoenvironment in western Europe: Sedimentology, geochemistry and organic petrology of the wells Mainzholzen and Wickensen, Hils Syncline, Lower Saxony Basin. International Journal of Earth Sciences.
- Castro-Vera L., Amberg S., Gaus G., Leu K. and Littke R., 2024 (akzeptiert). 3D basin modeling of the Hils Syncline, Germany: Reconstruction of burial and thermal history and implications for petrophysical properties of potential Mesozoic shale host rocks for nuclear waste storage. International Journal of Earth Sciences.

<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-Programm:</b> 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> 01.07.2023 bis 31.12.2023	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 2.250.056,65 EUR		<b>Projektleiter:</b> Dr. U. Noseck	

## 1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

## 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

TA 1: Bearbeitung grundlegender Aspekte

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

TA 2: Bearbeitung von Schwerpunktthemen

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

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- TA 1:
- Leitung der IGSC Core Group Treffen und der weiteren Treffen des Programmkomitees für das SC Symposium 2024. Vorbereitung der Topical Session "Lessons learnt from operation of facilities" und Leitung der jährlichen IGSC-Sitzung in Paris. Teilnahme mit Vortrag am NEA Workshop Extended Storage and Transportation, Teilnahme an der neuen Arbeitsgruppe GenSiS mit Vorbereitung eines Fragebogens. Teilnahme an den Sitzungen des EGAR-Bureaus, Teilnahme mit Vortrag am Workshop „The medium and the message: Challenges and solutions in selecting and preserving records of radioactive waste“ in Solna, Schweden und der SafeND in Berlin.
  - Finalisierung des Questionnaires für die CRC-Mitglieder zum Themengebiet „Software und Parameter“; Finalisierung des Status Reports; Einrichtung einer Arbeitsgruppe zur Bearbeitung des Program of Work (PoW) 2023 – 2024 (geochemische Bedingungen und Behälterkorrosion) und Beginn der Umsetzung einer Online-Datenbank zur Eingabe internationaler Referenzen zu diesem Themengebiet
- TA 2:
- Fortsetzung der Analyse von komplexeren Modellsystemen verschiedener Länder im Rahmen der gemeinsamen Aktivität zur Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse (JOSA); Untersuchungen zum Rauschfehler bei der Methode PAWN, Anwendung weiterer Methoden der Sensitivitätsanalyse wie QEASI und ELSA und Interpretation von Ergebnissen; Abstimmung mit den Partnern in mehreren Video-Gesprächen. Weiterarbeit an der Dokumentation Teil 2.
  - Abschluss 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 Abschluss-Workshop DECOVALEX D-2023 in Troyes, Frankreich. Mitarbeit am Abschlussbericht sowie federführende Ausarbeitung einer Veröffentlichung.
  - Teilnahme am online-Workshop der Task Force EBS im Oktober zum Abschluss von Task 13.
  - Fertigstellung eines Entwurfs für die Beschreibung von Task 14a.
  - Auf dem CatchNet Jahresmeeting in Kopenhagen wurden die Einfrierversuche vorgestellt, wobei insbesondere auf die Gefrierprozesse eingegangen wurde. Außerdem wurde eine aktualisierte Fassung der Modellrechnungen zur Talikbildung vorgestellt.
  - Es konnte wiederholbar ein Einfrieren in der gedruckten Kluffreplika beobachtet werden.
  - Präsentation der Arbeiten zum VIPER-Interface in COMSOL auf der COMSOL Conference Oktober 2023 in München.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- TA 1:
- Leitung der IGSC Core Group Treffen und der weiteren Treffen des Programmkomitees für das SC Symposium 2024 und Review der Abstracts. Mitarbeit in der neuen Arbeitsgruppe GeneSiS der IGSC, Auswertung des Fragebogens. Teilnahme und Vortrag auf der International Conference on Geological Repositories (ICGR).
  - Teilnahme an den Sitzungen des EGAR-Bureaus, Teilnahme mit Vortrag am 4. IDKM Plenary Meeting in Paris und an dem 4. Plenary Meeting der Arbeitsgruppe EGAR. Koordination und Bearbeitung des Abschlussberichts zum SER.
  - Versand des Questionnaires an CRC-Mitglieder und Auswertung der Antworten; Veröffentlichung des Status Reports; Eingabe internationaler Referenzen zum Thema

Geochemie und Behälterkorrosion in die Online-Datenbank; Planung und Durchführung des CRC-7 Plenary Meetings im Juni 2024 in Greimse/Schweiz

- Fertigstellung des Berichtes „Development of scenarios for repositories for radioactive waste in salt formations“ für den Salt Club.

- TA 2:
- Weiterführung der Analyse von Modellsystemen verschiedener Länder im Rahmen der gemeinsamen Aktivität zur Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse (JOSA). Fertigstellung der Dokumentation Teil 2, Planung weiterer Arbeiten.
  - Teilnahme am internationalen Vorhaben DECOVALEX 2027 mit Modellrechnungen für Salz und Kristallingestein.
  - Optimierung der Versuchsführung bei den Einfrierversuchen.
  - Fertigstellung der Beschreibung von Task 14a der Task Force on EBS zur Verteilung an die TF-Mitglieder.
  - Fortsetzung der Modellrechnungen zur Talikbildung.
  - Teilnahme am Jahresmeeting der CatchNet-Gruppe im September in White Horse, Kanada.

## **5. Berichte, Veröffentlichungen**

Tara LaForce, Jeroen Bartol, Dirk-Alexander Becker, Steven Benbow, Alexander Bond, Carl Rudolf Dietl, Tanja Frank, Rick Jayne, Ingo Kock, Fabiano Magri, Josh Nicholas, Marek Pekala, Philip H. Stauffer, Emily R. Stein, Jodie Stone, Jens Wolf: DECOVALEX-2023 Task F2-Salt Final Report, 2023.

Kröhn, M. und Fromme, L.: Development of a Special COMSOL® Interface Based on an Alternative Model for Bentonite Re-Saturation. Proceedings of the COMSOL-Conference 2023, München, 25. - 27. Oktober, 2023.

Kröhn, K.-P.: Investigations on talik formation during changes to cold climates. Proceedings of the COMSOL-Conference 2023, München, 25. - 27. Oktober, 2023.

<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> C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte; Endlagertechnik und (geo-)technische Barrieren C2.2 Endlagertechnik		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.07.2021 bis 31.10.2023	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2023 bis 31.10.2023	
<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 Salzbinder Polyhalit wird eine ausreichend hohe Stützwirkung des Versatzes erreicht, sodass nachfolgende Auflockerungen (Rissbildungen) im umliegenden Gebirge ausgeschlossen werden können. Die Anfangspermeabilität des Versatzmaterials liegt bei  $< 10^{-11} \text{ m}^2$ . Die Parameter Verformungswiderstand und Permeabilität verbessern sich mit zunehmender Gebirgskonvergenz. Die GESAV-Rezeptur wurde unter der Nr. DE 10 2015 005 288 patentiert.

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

## 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

<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:** Abgeschlossen (siehe vergangene Halbjahresberichte)

**AP2:** Parallel zu den untertäglich ausgelesenen Daten werden im 4-wöchigen Abstand Befahrungen der Versuchsorte durchgeführt, um Proben aus den Versatzkörpern zu entnehmen. Diese Proben werden geochemisch untersucht, um den Phasenbestand sowie die Entwicklung des Polyhalits nachvollziehen zu können. Der Beginn der Polyhalitbildung konnte bereits nachgewiesen werden. Der Abschluss der Polyhalit-Bildung konnte durch XRD-Messung auf einen Zeitpunkt von ca. 7 Monaten nach Einbau des GESAV-Versatzkörpers datiert werden. Im Vergleich zum GESAV-II-Projekt konnte der Zeitpunkt genauer spezifiziert werden durch kleinere Probenahmeintervalle. Es ist davon auszugehen, dass die Polyhalitbildung in-situ bereits nach 7 Monaten abgeschlossen ist und nicht wie bisher erwartet nach 10 Monaten.

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

### 4. Geplante Weiterarbeiten

**AP1:** Keine Weiterarbeiten nötig.

**AP2:** Die Versatzkörper werden nach Herstellung weiterhin kontinuierlich im Projekt SAVER II in regelmäßigen Abständen beprobt und geochemisch analysiert.

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

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

- Vorstellung SAVER-Projekte auf KOMPASS-II-Kick-Off
- Vorstellung SAVER-Projekt bei US/German Workshop
- Präsentation über Stand der Zusammenarbeit von SAVER und KOMPASS auf KOMPASS-II-Workshop
- Präsentation über SAVER-KOMPASS-Kollaboration auf US-German-Workshop in Braunschweig
- Vorstellung des SAVER-Projektes auf der SDIMI in Windhoek (Namibia)
- Präsentation zur SAVER-KOMPASS-Kooperation auf KOMPASS-Workshop in Santa Fe, USA
- Präsentation zum SAVER-Projekt auf US-German-Workshop in Santa Fe, USA
- Masterarbeit zum Thema: "Practical Model Approach for Relationship between POLLUX Emplacement Position and the Spatial Thermal Radiation in Dry Salt Grit Backfill"

<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> 01.07.2023 bis 31.12.2023
<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

AP6: Aufgießversuche der NaCl-AlCl<sub>3</sub>-Schmelze (50-100 mL) auf Salzgrus wurden im größeren Maßstab (1000 mL) wiederholt, um erste Skalierungseffekte zu beurteilen. Die Umsetzung des größeren Volumens führte jedoch zu keinem anderen Ergebnis: die Schmelze dringt kaum in den Salzgrus ein und erstarrt schnell im Kontaktbereich, wenn der Salzgrus Umgebungstemperatur aufweist und nicht bis auf eine Temperatur nahe dem Schmelzpunkt des NaCl-AlCl<sub>3</sub>-Gemischs ( $\approx 156$  °C) vorgewärmt wird.

Die Wechselwirkung von NaCl-AlCl<sub>3</sub>-Schmelze mit Magnesiabaustoff wurde durch Befüllen eines Bechers aus MgO-Baustoff der Rezeptur A1 (aus Bohrkern gedreht) mit der Schmelze untersucht. Es wurde die Reaktion der erstarrten Schmelze mit Feuchte aus der Luft und dem Hydratwasser des Magnesiabaustoffs unter Kristallisation von AlCl<sub>3</sub>·6 H<sub>2</sub>O und NaCl festgestellt. Die damit einhergehende Volumenzunahme und Expansionsdruckentwicklung führte schließlich nach mehreren Wochen zum Sprengen des MgO-A1-Bechers (Durchmesser ca. 10 cm, Tiefe ca. 5 cm, Wandstärke ca. 2 cm).

Das Anbindeverhalten der NaCl-AlCl<sub>3</sub>-Schmelze an Steinsalz wurde mit frisch präparierten Schmelzkörpern an bruchrauer Steinsalzoberfläche untersucht. Bei Scherversuchen an der Phasengrenze wurden hohe Spitzenscherfestigkeiten erreicht (Kohäsion  $C = 1,24$  MPa), welche vergleichbar mit der guten Anbindung von Magnesiabaustoffrezepturen an Steinsalz sind.

Andere Salzschnmelzsysteme (außer NaCl-AlCl<sub>3</sub>) aus dem Bereich der Niedertemperaturschnmelzen konnten nicht als geeignet für eine Anwendung als Verschlusskomponenten in einem Endlager in Steinsalz befunden werden. Es wurden daher keine weiteren Handhabungsversuche an anderen Schnmelzsystemen durchgeführt.

AP8: Die Berichtsstruktur wurde finalisiert. Die Projektbeteiligten arbeiten in enger Absprache an der Ausformulierung des Abschlussberichtes.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Im Zuge der Erstellung des Abschlussberichtes (AP8) wird mit Bezug zu AP1 das mögliche Verbesserungspotential durch den Einsatz von Salzschnmelzen an den identifizierten Lokationen in einem Endlager gegenüber anderen Materialien herausgearbeitet. Mit Bezug zu AP3 erfolgt die Szenarienableitung zur Temperaturentwicklung am Einsatzort und zu thermo-mechanischen Einwirkungen auf Verfüllbereiche sowie an Kontaktbereichen Schnmelze/Salz/Abschlusspfropfen (IfG). Mit Bezug zu AP7 werden notwendige Forschungsarbeiten für ein potientiell Anschlussprojekt formuliert, welche wichtige Daten für die Anwendbarkeit der NaCl-AlCl<sub>3</sub>-Schnmelze in einem HAW-Endlagerbergwerk durch großmaßstäbliche Versuche liefern würden (Langzeitversuche zu Expansionsdruck- und Permeabilitätsentwicklung, Wechselwirkungen mit zementbasierten Baustoffen, Skalierungseffekte, technologische Umsetzbarkeit, ...)

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Konferenzbeitrag: F. Häusler, D. Freyer, A. Keller, T. Popp, SaIVE: Ergebnisübersicht, Projektstatusgespräch 2023 zu BMUV-geförderten FuE-Projekten zur Entsorgung radioaktiver Abfälle, Karlsruhe, 06.11.2023.

<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> 01.07.2023 bis 31.12.2023	
<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 der BGE TECHNOLOGY GmbH und der TU Bergakademie Freiberg (mit dem Institut für Gebirgsmechanik in Leipzig als Unterauftragnehmer) (02E11971A)

## 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

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

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

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im Berichtszeitraum erfolgte ein Projektgespräch.

AP5: Beschreibung des Einbringkonzeptes: Auf Basis der vorliegenden Literaturwerte und experimentellen Untersuchungen wurde zunächst das Verschlusskonzept optimiert und die Prozesskette aktualisiert. Aufgrund der Volumenverkleinerung der Salzschnmelze beim Abkühlen wurde das Einbringkonzept dahingehend erweitert, dass auch nach einer Abkühlphase noch weitere Befüllvorgänge durchgeführt werden. Dies wird unter anderem durch eine Schutzatmosphäre ermöglicht, die für eine möglichst geringe Luftfeuchtigkeit sorgt. Hiermit soll einer oberflächlichen Reaktion der Schmelze vorgebeugt werden.

Bewertung der Einsatzfähigkeit: Die Bewertung des optimierten Verschlusskonzeptes erfolgt anhand einer verkürzten FEP (Features, Events, Processes) -Liste, mit deren Hilfe ausgesuchte Einflüsse der Verschlusselemente aus Salzschnmelze dem Ursprungskonzept gegenübergestellt werden. Eine Hinführung wurde im Bericht in den entsprechenden Kapiteln ergänzt.

Beschreibung qualitätssichernder Maßnahmen für den Bau des Verschlusselementes: Die Qualität der Salzschnmelze wird durch die Prüfung der Rohmaterialien und die Einhaltung der Arbeitsschritte bis vor Ort gleichbleibend hochgehalten. Bei der Lagerung muss insbesondere das  $\text{AlCl}_3$  vor Feuchtigkeit geschützt werden. Dies gilt ebenfalls für den Befüllvorgang des Verschlusselementes unter Tage, wenn Trennfugen vermieden werden müssen. Aufgrund der Volumenverkleinerung wird die vollständige Füllung der Strecke erst über Abkühlzeiträume und nachträgliche Befüllungen erreicht. Das Ergebnis nach dem Abkühlen kann anhand der kleinmaßstäblichen Experimente jedoch nicht präzise abgeschätzt werden. Die durchschnittliche Porosität wird anhand einer Gegenüberstellung der theoretischen Dichte und dem Verhältnis aus der eingefüllten Masse mit dem vermessenen Hohlraumvolumen bestimmt. Eine Abschätzung der Permeabilität eines solchen Bauwerkes anhand der Porosität und der kleinmaßstäblichen Untersuchungen ist derzeit nicht glaubwürdig umsetzbar. Eine nachträgliche Qualitätsprüfung des neuen Salzschnmelzenlementes ist grundsätzlich schon kurz nach dem Einbau möglich, weswegen sich der Baustoff gut für ein Demonstrationsbauwerk eignet. An einem solchen Bauwerk können anhand zerstörender Prüfungen grundlegende Parameter wie Porosität, Permeabilität und Festigkeitswerte mit Bezug zur jeweiligen Lokation im Bauwerk bestimmt werden. Dieses Wissen kann wiederum bei der Prüfung nachfolgender Bauwerke helfen.

AP8: Berichterstellung

### 4. Geplante Weiterarbeiten

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

AP8: Berichterstellung

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

-

<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-Programm:</b> C. Forschungsgebiet Endlagerung, 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> 01.07.2023 bis 31.12.2023	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 813.471,50 EUR		<b>Projektleiter:</b> PD Dr. habil. Andrés G. Muñoz	

### 1. Vorhabenziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

Dazu wird eine umfassende Korrosionsstudie erstellt, die innovative Laboruntersuchungen mit Blick auf die Vorbereitung von Feldexperimenten in einem Bohrloch am Grimsel-Felslabor beinhaltet.

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

### 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

Im Einzelnen werden folgende Teilziele verfolgt

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

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

#### Elektrochemische Untersuchungen (AP 1.1)

*Untersuchung von Korrosionsmechanismen:* Einige Experimente in Opalinuston-Wasser unter hohem hydrostatischem Druck wurden zur Sicherung der Reproduzierbarkeit wiederholt. Durch eine tiefere Analyse der Ergebnisse ließ sich ein deutlicher Anstieg der Korrosionsgeschwindigkeit mit dem hydrostatischen Druck erkennen.

Korrosion unter Gamma-Strahlung: Untersuchungen der Korrosion von Gusseisen GGG40 in gesättigtem Bentonite unter Gamma-Strahlung wurden in Kooperation mit UJV-Rez, Prag durchgeführt. Dabei wurden polierte Proben von GGG40 in einer übergesättigten Bentonit-Suspension (1:10 g Bentonit zu g Opalinuston-Wasser) für 220 Tage in einem geschlossenen Gefäß bei 50°C unter Strahlung gelegt. Die Chemie der korrodierten Oberfläche und die des an der Oberfläche geklebten Bentonits wurden mittels REM-EDX und XPS untersucht. Die überstehende Lösung wurde mittels ICP-OES analysiert. Bentonit-Proben sind noch bei der BGR für weitere XRD- und Thermogravimetrie-Analysen.

#### Monitoring der Grenzflächenparameter in Langzeit-Laborexperimenten (AP 1.2)

*Korrosionsexperimente in gesättigtem Bentonit:* Aufgrund der Undichtigkeit der mit Wasserbad thermostatisierten Bentonit-Zelle wurde eine neue, durch ein elektrisches Heizungssystem erhitzte Zelle entworfen und gebaut. Die neue Zelle zeigt viele Vorteile im Vergleich zu dem vorherigen Modell, wie etwa die leichtere Handhabung, die Möglichkeit einer schnelleren Entgasung mittels Blubbern von Argon und eine verbesserte Positionierung des Sensors. Leider haben sich die Arbeiten wegen unerwarteten technischen Schwierigkeiten bei der Umsetzung der Heizungsschleife seitens unseres Labors in die Länge gezogen. Aktuell sind diese aufgehoben und die Monitorings-Experimente mit der CuNi30Mn1Fe-Legierung (2.0882) werden im Februar 2024 fortgesetzt.

*Sensorik:* Das neue Zellendesign beinhaltet eine 2 mm Durchmesser Iridium-Elektrode, die zentrisch 1 mm über die Probe positioniert wird. Vorläufige Messungen haben gezeigt, dass ein in-situ Wachstum des Oberflächenoxides durch Zyklovoltammetrie möglich ist. Dieses Oxid verfügt über eine deutliche Empfindlichkeit zum pH-Wert und daher eignet sich hervorragend als robuster pH-Sensor.

#### Organisatorisches

Organisation und Präsentation der Ergebnisse auf dem 4. Projekttreffen am 18. und 19. Januar 2024 bei der GRS in Braunschweig. Außer der Darstellung der Projektergebnisse wurden dabei Strategien mit Blick auf eine Vervollständigung der geplanten Arbeiten und die Realisierung der zu Beginn des Projektes skizzierten in-situ Arbeiten am Untertagelabor Grimsel (CH) diskutiert, die durch eine mögliche Verlängerung der Projektlaufzeit zu erreichen wären.

#### 4. Geplante Weiterarbeiten

Weitere Arbeiten für die erste Hälfte 2024 werden den Fokus auf die folgenden Punkte legen:

- die Inbetriebnahme des angeschafften elektrochemischen Rasterelektronenmikroskops (AP 1.1) und
- die Vervollständigung der Langzeitexperimente der Korrosion von CuNi30Mn1Fe (2.0882) (AP 1.2)

#### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Corrosion mechanisms at the interface of container materials – bentonite barriers  
Electrochemical and spectroscopic studies / Project IMKORB (Vortrag). A.G. Muñoz,  
Projektstatusgespräch 2023 (November 6-7, 2023) Karlsruhe

Graphite Cast Iron GGG40 for Disposal Containers: The Corrosion Mechanism in Opalinus Clay Water (Vortrag). A.G. Muñoz, D. Schild, 244th ECS Meeting (October 8-12, 2023) Gothenborg.

Corrosion processes at the GGG40 steel–bentonite interface (Poster). A.G. Muñoz, D. Schild, Safety of Nuclear Waste Disposal (September 13-15, 2023) Berlin.

Corrosion mechanisms of spheroidal graphite cast iron GGG40 in saturated Wyoming bentonite. A.G. Muñoz, D. Schild, EUROCORR 2023 (August 27-31, 2023) Brussels (Vortrag).

<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> C. Forschungsgebiet Endlagerung, C3 Sicherheitsnachweis, C3.1 Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-)Phänomene und Prozesse.		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.08.2021 bis 31.07.2024	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2023 bis 31.12.2023	
<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 Analyse der Proben aus Korrosionsexperimenten unter statischen Bedingungen in Autoklaven bei Raumtemperatur (RT) und bei 50°C mit 6 Monaten Reaktionszeit wurden beendet. Die Korrosionsrate nimmt für beide Werkstoffe (Feinkornbaustahl, Federstahl) mit zunehmender Zeit ab, was auf die Bildung einer Schutzschicht hindeutet. Die Bildung von Fe-Silikaten konnte mit Hilfe von SEM-EDX in Experimenten bei 50°C nachgewiesen werden, in Übereinstimmung mit Literaturergebnissen. Proben aus Experimenten unter dynamischen Bedingungen bei RT und bei 50°C mit 3 Monaten Reaktionszeit wurden analysiert. Für das Porenwasser im Auslass-Reservoir nähert sich der pH-Wert mit zunehmender Reaktionszeit dem Wert im Einlass-Reservoir. Im Experiment mit Feinkornbaustahl bei RT deuten SEM-EDX Daten die Neubildung von Fe-Silikaten an. Zusätzliche Analysen dauern noch an. Eine neue Experimentserie mit geplanten 6 Monaten Reaktionszeit wurde vorbereitet.

Korrosionsexperimente bei Raumtemperatur wurden in Gefäßen mit Schliffstopfen angesetzt, um niedrigere Sauerstoffgehalte zu erreichen ( $<0.1$  ppmv  $O_2$ ) und zum Test ob Restsauerstoff ein Einfluss auf die Korrosionsrate und -prozesse hat. Für den Feinkornbaustahl und einen Grauguss wurden Parallelversuche angesetzt um den zeitlichen Ablauf verfolgen zu können. Die elektrochemischen Experimente wurden in der Ar-Box wiederholt um die Reproduzierbarkeit der Daten sicherzustellen. Ergebnisse deuten auf eine höhere Tendenz zu aktiver Auflösung des Feinkornbaustahls, sowie auf eine gleichmäßigere Korrosion, verglichen zu dem Federstahl, hin.

**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:** Ein Manuskript über die Experimente in Autoklaven wurde begonnen.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

**AP 3:** Die Experimente mit 6 Monaten Reaktionszeit unter dynamischen Bedingungen sollen abgeschlossen werden. Die Charakterisierung der Probencoupons aus Experimenten unter dynamischen Bedingungen mit 3 Monaten Reaktionszeit soll ebenso abgeschlossen werden. Experimente in Gefäßen mit Schliffstopfen sollen bei zunehmender Reaktionszeit fortgesetzt und anschließend analysiert werden.

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

**AP 6:** Die Priorität liegt auf dem Schreiben der Dissertation.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

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

<b>Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer:</b> Leibniz Universität Hannover		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E11981C</b>
<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> C. Forschungsgebiet Endlagerung, C3 Sicherheitsnachweis, C3.1 Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-)Phänomene und Prozesse.		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.08.2021 bis 31.07.2024	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2023 bis 31.12.2023	
<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 2023 wurden die Untersuchungen auf eine feinere Charakterisierung im Hinblick auf die Korrosionseigenschaften ausgeweitet. Hierzu wurden wie geplant elektrochemische Untersuchungen durchgeführt, wobei sich die wesentlichen Arbeiten auf den Aufbau der elektrochemischen Versuche konzentrierten. Dabei wurden die Festlegungen zur Konstruktion der Messzelle umgesetzt sodass im ersten Halbjahr 2024 die Messkampagne durchgeführt und abgeschlossen werden kann. Die Auswahl des für die Durchführung der Korrosionsversuche notwendigen Elektrolyt, erfolgte anhand der durchgeführten Literaturrecherche. Dabei standen zwei wesentliche Kriterien im Fokus. Erstens der Endlagerbezug im Hinblick auf die zu erwartenden Elektrolytzusammensetzungen und zweitens die Notwendigkeit den Korrosionsprozess möglichst beschleunigt durch eine gesteigerte Aggressivität im elektrochemischen Versuch abzubilden. Die Literaturrecherche ist abgeschlossen und es erfolgt derzeit die Festlegung des Modellelektrolyten in Diskussion mit den Projektpartnern. Die in den bisher durchgeführten Arbeiten erzielten Erkenntnisse geben bisher einen noch eingeschränkten Blick auf richtungsabhängige Eigenschaftsprofile und damit noch kein klares Bild über den Einfluss, z.B. herstellungsbedingter anisotroper Gefügeausbildung hinsichtlich der zu erwartenden Langzeitbeständigkeit der untersuchten Werkstoffe. Hier ist die noch zu erwartende EBSD Charakterisierung notwendig, um die phänomenologischen Erkenntnisse mit den werkstoffkundlichen Grundlagen final verknüpfen zu können. Des Weiteren wurden gemeinsam mit dem Projektpartner BGR Analysen im Röntgenmikroskop durchgeführt, um eine zerstörungsfreie Untersuchung der in Bentonitumgebung eingelagerten Metallproben zu ermöglichen.

Die ursprüngliche weitere Charakterisierung mittels EBSD konnte aufgrund fehlender Mittel bisher noch nicht durchgeführt werden. Hierzu erfolgte im Berichtszeitraum eine Mittelverlagerung der Investitionsmittel, sodass die Investitionsmittel nun für das 2. HJ2023 und das 1. HJ2024 zur Verfügung stehen. Der Beschaffungsprozess ist im Berichtszeitraum gestartet und die Bestellung ausgelöst worden sodass die Lieferung von Komponenten zum Auftragnehmer „Ellcie“ noch im Dezember 2023 erfolgt ist. Der Zusammenbau und die Installation erfolgen demnach im ersten HJ 2024 sodass der Beschaffungsprozess im ersten HJ 2024 abgeschlossen werden kann und damit für den Beginn der EBSD-Charakterisierung erst ab der Inbetriebnahme erst ein exakter Zeitplan aufgestellt werden kann.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Im weiteren Verlauf sollen die beschriebenen Korrosionsversuche finalisiert werden. Die Beschaffung, Installation und Inbetriebnahme der EBSD Messtechnik in das betreffende Großkammerelektronenmikroskop erfolgt zu Beginn des 1. HJ2024. Weiterhin sollen anschließend die vorgesehenen Elektronenbeugungsversuche, wie im Aufstockungsantrag vorgesehen, zur weiteren Charakterisierung durchgeführt werden. Durch die zeitliche Verschiebung der Beschaffung des EBSD-Gerätes und aufgrund des Umfangs des noch notwendigen Untersuchungsprogrammes sowie der im Anschluss erforderlichen strukturierten Zusammenführung der Ergebnisse im Gesamtprojekt kann der avisierte Projektabschluss zum 31.07.2024 voraussichtlich nicht gehalten werden, sodass das Konsortium einen Aufstockungsantrag um weitere 12 Monate plant. Damit soll sichergestellt werden, dass die Ergebnisse des Projektverbundes IMKORB einerseits in der notwendigen Qualität und Quantität verfügbar sind. Andererseits ist nur durch die damit zu erwartende Ergebnislage eine Übertragung der methodischen Projektansätze in den Bereich der Suche und Prüfung von Endlagerbehältermaterialien, insbesondere in Bezug auf zu planende Langzeitexperimente (z.B. Grimsel) realistisch und möglich. Hierzu plant das gesamte Konsortium nach dem Abschluss der Vorhabens IMKORB die weiterführende praxisrelevante Erforschung der Monitoringkonzepte sowie der Langzeitstabilität der Behältermaterialien.

### **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; C1.2 Charakterisierung des Geosystems und Geosynthese		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2021 bis 30.09.2024	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2023 bis 31.12.2023	
<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: -

AP2: -

AP3: Durchführung von Triaxialkriechversuchen mit neuartiger verzerrungsgeregelter Versuchstechnik

AP4: Diskretisierung ausgewählter Tragsysteme für numerische Sensitivitätsanalysen.

AP5: -

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

AP1: -

AP2: -

AP3: Weitere Durchführung und Auswertung von Triaxialversuchen

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

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

Düsterloh, U.; Lerche, S. (2023): KRIECHTECH: Entwicklung und Validation einer neuartigen Versuchstechnik für triaxiale Kriechversuche bei geringer deviatorischer Belastung, Vortrag Projektstatusgespräch 2023, Karlsruhe, 06.11.2023 – 07.11.2023.

<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> 01.07.2023 bis 31.12.2023	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 323.058,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Katja Emmerich	

### 3. 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.

### 4. 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)

## 5. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

**AP1:** Die mineralogische Grundcharakterisierung (XRD, XRF, STA, CEC, AFM, ESEM, Gasadsorption) beider Bentonite ist abgeschlossen. Beide Bentonite enthalten als Hauptbestandteil dioktaedrische Smectite. Die homoionische Belegung ( $\text{Na}^+$ ,  $\text{K}^+$ ,  $\text{Ca}^{2+}$  und  $\text{Mg}^{2+}$ ) der Tonfraktion beider Bentonite wurde zu >95% erreicht. Die spezifische Oberfläche ( $\text{N}_2$  Adsorption) der Tonfraktion des Calcigels ist geringer als beim Secursol UHP. AFM Messungen bestätigten etwas geringere laterale Ausdehnungen des Smectits im Secursol UHP.

Die Erfassung der Wasserdampfadsorptionsisothermen der homoionischen Tonfraktionen sowie der Schlufffraktion wurde begonnen.

Die Reproduzierbarkeit der Quelldrücke in den Miniquelldruckzellen wurde untersucht. Es wurden Abweichungen von +/- 22% vom Mittelwert aus 10 Messungen mit gleichen Einbau- und Bewässerungsparametern beobachtet.

Testmessungen an trockenen und gesättigten Proben mittels  $\mu\text{CT}$  wurden durchgeführt. Die Kalibrierung der Grauwerte zur Beobachtung der Porositätsänderungen dauern an.

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

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

**AP4:** Der Projektstand und geplante Weiterarbeiten wurde in einem Projekttreffen im November in Bochum diskutiert. Zudem findet ein kontinuierlicher Austausch mit dem Sandwich-HP2 (02E11799A/B/C) statt.

## 4. Geplante Weiterarbeiten

**AP1:** Verbesserung der Reproduzierbarkeit der Quelldruckmessungen, Anpassung der Bildverarbeitung zur Auswertung der  $\mu\text{CT}$  Aufnahmen hinsichtlich Gefüge und Porenverteilung und deren Änderung während der Aufsättigung.

Auswertung der Wasserdampfadsorptionsisothermen sowie Durchführung von Enslin-Neff Messungen bei konstanten Temperaturen.

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

**AP4:** Paper der mineralogischen und geotechnischen Grundcharakterisierung

## 5. Berichte, Veröffentlichungen

Asaad, A., Nitsch, A., Baille, W., & Emmerich, K. (2023). The Sandwich Support Project 1 (Sandwich-SP1): Swelling pressure behavior and the kinetic of cationic exchange capacity of two German bentonites. Poster, Euroclay, Bari, Italy.

Asaad, A. Nitsch, A., Baille, W., & Emmerich, K. (2023). SANDWICH-SP1: Heterogeneous hydration of bentonites. Vortrag, Projektstatusgespräch zu BMUV-geförderten FuE-Projekten zur Entsorgung radioaktiver Abfälle, Karlsruhe.

<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> 01.07.2023 bis 31.12.2023	
<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 Bentonitdichteelementen aus nationalen Ca-Bentoniten in Kontakt mit Na-reichen Porenwässern potentieller Wirtsgesteine basierend auf den initialen und sich ändernden Randbedingungen, Hydratationsbedingungen und physiko-chemischen Bentoniteigenschaften. Damit erfolgt der Skalenübergang von der molekularen auf die makroskopische Ebene. Das Vorhaben trägt dazu bei, die Frage zu beantworten, ob die Bentonitbarriere einen Gleichgewichtszustand bei  $t = \infty$  erreicht, wodurch die Ermittlung des Gesamtverhaltens des Systems im SANDWICH-Hauptprojekt verbessert wird. Das Projekt ist ein Verbundprojekt zwischen KIT und RUB. Die Projektleitung liegt bei KIT.

## 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

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

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

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

AP4: Koordination/Berichtswesen (KIT)

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

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

**AP2:** Die geotechnische Klassifizierung ist abgeschlossen. Zusätzlich wurden Enslin-Neff-Versuche, die Korngrößenermittlung (KGV) mittels Sedimentationsanalyse und Proctor-Versuche durchgeführt. Für KGV und Proctor-Versuch sind ergänzende Versuche erforderlich.

Die volumenkonstanten Quelldruckversuche (QDV, DV=konstant) an homogenen Proben beider Smectite mit  $\rho_d=1.25$  bis  $1.7 \text{ g/cm}^3$  sind abgeschlossen. Die QDV (DV=konstant) an heterogenen Proben sind in Bearbeitung. Die bisherigen Ergebnisse zeigen ein Einfluss der Heterogenität auf die Kinetik des Quelldrucks. Messungen im Ausbauzustand zeigten eine Homogenisierung hinsichtlich Trockendichte / Sättigungsgrad über die Probenhöhe. Die ödometrischen Kompressionsversuche (Be-, Ent- und Wiederbelastung) an teilgesättigten Proben (as compacted) und an gesättigten (DV=konstant) Proben sind abgeschlossen. Die Quellhebungsversuche sind abgeschlossen. Die Bestimmung der SWCC (Bewässerung, DV=konstant) wurde für Saugspannungen  $< 10 \text{ MPa}$  ergänzt und ist nahezu abgeschlossen.

Der erste Säulenversuch (Calcigel) wurde im vorangegangenen Berichtszeitraum (März 2023) gestartet. Die Erfassung der Daten aller Sensoren funktioniert wie geplant und die beobachteten Zeitverläufe sind plausibel. Der Ausbau inklusive einer systematischen Beprobung des Ausbauzustands ist für März 2024 geplant.

**AP3:** Es wurde mit der Kalibrierung der konstitutiven Parameter für das kontinuumsmechanische Modell (BBM (Alonso et al., 1990) in Kombination mit van Genuchten (1980)) anhand der Elementversuche (Oedometerversuche / Quelldruckversuche homogene Proben) begonnen.

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

### 4. Geplante Weiterarbeiten

**AP2:** Für die Kornverteilung mittels Sedimentationsversuch sowie für die Ermittlung der Proctor-Kurve an SecUHP und Calcigel sind Wiederholungsmessungen erforderlich. Fortführung und Beendigung der Elementversuche an heterogenen Proben.

Vervollständigung Quell(druck)versuche mit „technological void“; 2) Quelldruckversuche mit saugspannungskontrollierter Sättigung über die Dampfphase, 3) Beendigung der laufenden Versuche zur Ermittlung der SWCC bei volumenkonstanten Bedingungen

Ausbau und Beprobung des ersten Säulenversuches an Calcigel. Einbau des zweiten Säulenversuches innerhalb des 2. Quartals 2024.

**AP3:** Fortsetzung / Beendigung der Parameterkalibrierung sowie Fortsetzung der Simulation der Quelldruckversuche und der Säulenversuche.

**AP4** Publikation der mineralogischen und geotechnischen Grundcharakterisierung.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

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

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 12012A</b>
<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 C3.3 Werkzeuge der Sicherheitsanalysen, Punkt 2		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2022 bis 30.09.2025	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2023 bis 31.12.2023	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 1.915.790,00 EUR	<b>Projektleiterin:</b> A. Schneider	

## 6. 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.

## 7. 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 Anwendungen
- AP 4.1 Würfel mit Kluffnetzwerk
- AP 4.2 Äspö site descriptive model
- AP 4.3 Laborexperiment (Richardsgleichung)
- AP 4.4 Norddeutscher Küstenraum (Ankopplung Vorfluter)
- AP 5 Wartung des Codes (Unterauftrag)
- AP 6 Projektleitung und Dokumentation

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP 1.1 Mit dfnWorks wurde ein diskretes Klufnetzwerk (DFN) mit 69 Klüften für ein würfelförmiges Modellgebiet erzeugt und in d<sup>3f++</sup> eingelesen. Die Parameterübergabe wurde automatisiert. Ein Rechengitter wurde erzeugt und erste Strömungs- und Transportrechnungen mit 2.25 Mio. Gitterelementen durchgeführt. Weiterer Automatisierungsbedarf wurde identifiziert.
- AP 1.2 FracMan gibt die Parameter für Kontinuumsmodelle auf einem vordefinierten, regelmäßigen Gitter aus, was für d<sup>3f++</sup> als nicht optimal ist, weil es der Gitterverfeinerung Grenzen setzt. Ein Konzept zur Erstellung von Kontinuumsmodellen ist in Arbeit.
- AP 1.3 Verbesserungsbedarf für den Präprozessor beim Einlesen von Klufnetzwerken wurde definiert und umgesetzt.
- AP 2.1 Der Einfluss der Salinität auf die Phasenübergänge wurde in die Modellgleichungen aufgenommen. Erste Tests wurden durchgeführt. Abweichungen der Ergebnisse aus dem Projekt HYMNE von den INTERFROST-Ergebnissen wurden analysiert. Ein Bericht über die mathematische Beschreibung im Modell ist in Arbeit. Die korrekte Form der Erhaltungsgleichungen wurde erarbeitet.
- AP 4.2 Eine Literaturrecherche zu Klufstatistik wurde durchgeführt und Daten für die weiteren Arbeiten wurden identifiziert.
- AP 4.3 Die Arbeiten an der Modellierung des Laborexperimentes wurden sowohl mit dem Levelsetverfahren als auch mit dem Phasenfeldmodell weitergeführt.
- AP 5 Die Bilanzierung für den Stofftransport wurde vereinfacht. Probleme bei der Modellierung der kinetischen Sorption wurden behoben.
- AP 6 Der Kooperationsvertrag mit der Universität Frankfurt wurde unterzeichnet. Das zweite Projektstatusgespräch fand am 12./13.10.2023 in hybrider Form bei der GRS in Braunschweig statt.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- AP 1.1 Automatisierung der Anbindung des Klufgenerators.
- AP 1.2 Fertigstellung des Konzeptes Anbindung von Kontinuumsmodellen (EPM) an d<sup>3f++</sup>.
- AP 2.1 Die theoretischen Arbeiten zur Berücksichtigung der Salinität bei den Phasenübergängen und die Implementierung werden fortgesetzt. Zustandsgleichungen und konstitutive Beziehungen werden ergänzt. Der Bericht über den mathematischen Rahmen wird vervollständigt.
- AP 4.2 Die Klufstatistikdaten von SKB werden dazu verwendet, diskrete Klufnetzwerke (DFN) zu erzeugen und daraus Permeabilitäten abzuleiten, die für Rechnungen in d<sup>3f++</sup> verwendet werden.
- AP 4.3 Die Arbeiten an der Modellierung des Laborexperimentes werden abgeschlossen.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Kröhn, K.-P.: Investigations on talik formation during changes to cold climates. Proceedings of the COMSOL-Conference 2023, München, 25. - 27. Oktober, 2023.

Das Projekt HYMNE II wurde in Form eines Posters beim PTKA Projektstatusgespräch zu BMUV-geförderten FuE-Projekten zur Entsorgung radioaktiver Abfälle am 6./7. November 2023 in Karlsruhe vorgestellt.

<b>Auftragnehmer:</b> Johann Wolfgang Goethe Universität Frankfurt		<b>Förderkennzeichen:</b> 02 E 12012B
<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> 01.07.2023 bis 31.12.2023	
<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, zeit-paralleles Lösungsverfahren entwickelt und implementiert werden. Der Umgang mit Datenun-gewissheiten und die Robustheit der Lösungsverfahren werden weiter verbessert. Durch die Anwendung der kürzlich implementierten sowie der in diesem Vorhaben zu implementierenden Verfahren auf endlagerrelevante Modelle im regionalen Maßstab im Kluft- und Sedimentgestein, mit freier Grundwasseroberfläche und Vorflutern sowie auf Laborexperimente sollen in Teilziel 4 (abgebildet in AP4) die neuen Möglichkeiten des Programms umfangreich getestet, die Prognosesicherheit gestärkt und das Vertrauen in die Modellierung gestärkt werden. Die Ergebnisse werden zusammen mit den Projektpartnern verwertet. Die große Nutzergemeinde des Simulationssystems UG ist eine ausgezeichnete Plattform zur Verbreitung und Verwertung der Projektergebnisse. Es erfolgt eine Zusammenarbeit mit der Gesellschaft für Reaktorsicherheit (GRS), Braunschweig, und der Firma TechSim, Kieselbronn, als Unterauftragnehmerin der GRS. Das Verbundprojekt ist ein Folgevorhaben des BMW-Projekts vom 01.10.2019 – 30.11.2022 (FKZ 02 E 11809B).

## 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

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

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

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

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

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

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

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

Die Arbeiten wurden entsprechend der im Antrag angegebenen Vorgehensweise fortgesetzt.

*AP 2: Erweiterung des Anwendungsbereiches von d3f++ (2.1. Permafrost: Berücksichtigung der Salinität bei den Phasenübergängen, <sup>11</sup>2.2. Radionuklidtransport: Genauere und effektivere Modellierung)*

Die Arbeiten wurden entsprechend der im Antrag angegebenen Vorgehensweise fortgesetzt.

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

Der Fehler bei der parallelen Berechnung des Dichteflusses auf der gebrochenen Matrix wurde gefunden und behoben. Ursache hierfür war die Verfeinerungsmethode namens GlobalFracturedMediaRefiner in ug4, die speziell für die Verfeinerung von Gittern mit niedrigdimensionalen Elementen implementiert wurde. Die Methode kopierte die nicht markierten Flächen, d. h. die Flächen in den Brüchen, direkt in das verfeinerte Gitter, ohne die Unterschiede der Flächenseiten zu berücksichtigen. Tatsächlich umfassen die Flächen in den Brüchen zwei Arten von Seiten. Die erste Art sind die Kanten zwischen den Knoten mit identischer Lage. Sie sollten nicht verfeinert werden. Das zweite sind die Kanten, die mit der Matrix verbunden oder parallel zur Matrix sind. Sie sollten verfeinert werden. Dies bedeutet, dass die Seiten der zweiten Art aufgrund der nicht markierten Flächen erhalten blieben und auch durch die markierte Matrix verfeinert wurden. Schließlich war das verfeinerte Gitter aufgrund der Duplizierung solcher Seiten nicht korrekt. Jetzt wird die Verfeinerungsbedingung von Flächen korrigiert, sodass nur die Seiten der ersten Art in das verfeinerte Gitter kopiert werden.

Der Zeitschritt konnte mit dem Limex-Plugin nicht abgeschätzt werden, da die Brüche geometrisch Null sind. Daher sind die Komponentenräume von Limex, d. h. H1EnergyComponentSpace und L2ComponentSpace, in ug4 so festgelegt, dass sie vom gegebenen Unterraum abhängen, sodass Limex den Zeitschritt vorübergehend basierend auf den Unterräumen, die geometrisch nicht Null sind, schätzen kann.

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

Im Rahmen der Untersuchung der Kopplung von Oberflächenwasserströmung und Grundwasserströmung wurde ein Gerüst für das Boundary Condition Switching zum Massentausch zwischen Grundwasserdomäne und Vorfluternetzwerk implementiert. Dabei wird nach jedem Zeitschritt des Lösungsprozesses ein Flussnetzwerk durch die Saint-Venant Gleichungen simuliert und anschließend der Massenaustausch durch ein Interface beider Gebiete berechnet. Hierbei wird dieser durch Randbedingungen auf dem Grundwassergebiet und Quelltermen in den Saint-Venant Gleichungen dargestellt. Dadurch können beide Probleme mit unterschiedlichen Zeitschrittweiten berechnet werden, ohne dass der Oberflächenfluss die Gesamtberechnung durch kleinere Zeitschrittweiten ausbremst. Die Berechnung des Austauschflusses soll weiter untersucht und verbessert werden, um in Zukunft den Massenerhalt zwischen beiden Gebieten in jedem Fall zu gewährleisten.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Die Arbeiten werden entsprechend der im Antrag angegebenen Vorgehensweise fortgesetzt.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

- keine -

<b>Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer:</b> TU Clausthal – Lehrstuhl für Geomechanik und multiphysikalische Systeme		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 12022A</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Internationales Benchmarking zu Verifizierung und Validierung von TH2M-Simulatoren insbesondere im Hinblick auf fluiddynamische Prozesse in Endlagersystemen – Erweiterung auf multiphysikalische Ansätze und mehrdimensionale Modellgeometrien		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> C3: Sicherheitsnachweis; C3.1 Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-)Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.02.2023 bis 31.01.2026	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2023 bis 31.12.2023	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 523.623,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Eleni Gerolymatou	

## 1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

## 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

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

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

Bisher wurden unter den Projektpartnern sechs Treffen durchgeführt. Es erfolgte eine leichte Optimierung der Materialparameterliste für Tonstein und Bentonit, welche nun mit einer umfangreichen Literaturliste belegt ist. Eine äquivalente Materialparameterliste für Steinsalz und Salzgrus wurde entwickelt, aber nach anschließender Diskussion mit Partnern als optional deklariert. Bei Modell 1.4 wurde in Absprache mit den Partnern eine Vereinfachung der Modellgeometrie vorgenommen. Die Bearbeitung von Modell 2 wurde vorläufig nach hinten gestellt, da Unschlüssigkeit bei der Modellgeometrie und -randbedingungen existierten und der vorläufige Bearbeitungsfokus auf die verschiedenen Prozessstufen von Model 3 gelegt wurde. Für Model 3 wurden ausgehend von thermomechanischen Simulationsvarianten (Model 3.1) mehrere Prozessschritte definiert, welche bis zu TH<sup>2</sup>M-Varianten (Model 3.5) führen. Es erfolgte hierbei auf jeder Prozessebene die Definition einer Basisvariante. Seitens der TU Clausthal wurde alle aktuellen Basissimulationen durchgeführt und es wurde für die Modelle 1.4 und 3.1 die ersten Partnervergleiche vorgenommen.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Für das nächste Halbjahr werden die Simulationsergebnisse weiterer Partner zum Model 1.4 erwartet. Weiterhin wird mit dem Eingang weiterer Simulationsergebnisse der Partner für die Prozessstufen von Modelle 3 gerechnet. Aufbauend auf diesen Ergebnissen wird ein ausführlicher Partnervergleich mit einer verknüpften Interpretation der Berechnungsergebnisse angestrebt.

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

Noch keine vorhanden.

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> 02 E 12022B	
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Benchmarking for Verification and Validation of TH <sup>2</sup> M Simulators with special regard to fluid dynamic processes in repository systems – physical and geometrical enlargements (BenVaSim-II)			
<b>Zuordnung zum FuE-Förderprogramm:</b> C3: Sicherheitsnachweis; C 3.1 Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-) Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung			
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.02.2023 bis 31.01.2026		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2023 bis 31.12.2023	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 512.650,00 EUR		<b>Projektleiterin:</b> Larissa Friedenberg	

## 1. Vorhabenziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

## 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

### AP 1: Entwicklung generischer Simulationsmodelle und Definition von Parametersätzen

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

### AP 2: Durchführung und Bewertung von Modellrechnungen

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

### AP 3: Vergleich und Diskussion der Ergebnisse

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

### AP 4: Synthese und Präsentation der Endergebnisse

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

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

Im Berichtszeitraum fanden 3 virtuelle Meetings (10.07, 24.8, 21.9), sowie ein Präsenzmeeting am 13.11.2023 in Troyes statt. Die virtuellen Meetings dienen dem ersten Vergleich von Ergebnissen, vor allem aber der Finalisierung der Modelle und der Materialparameter. Bei dem Präsenzmeeting wurden die finalisierten Modelle vorgestellt und es wurden Ergebnisse diskutiert.

Die GRS unterstützt die Projektkoordinatorin TU Clausthal bei der Definition der Modelle und Vorgehensweise, außerdem beteiligt sie sich mit zwei Simulationscodes an den Modellierungen: CODE\_BRIGHT und Comsol Multiphysics. Im Berichtszeitraum wurde aufbauend auf den vorherigen Ergebnissen am eindimensionalen Model (Model 1.4) gearbeitet und die Ergebnisse modifiziert. Zudem wurde mit der Modellierung des ersten zweidimensionalen Models (Model 3) begonnen, welches eine „Plane Strain“ Geometrie besitzt. Die Modellierungsarbeiten sollen mit steigender Komplexität durchgeführt werden. Die GRS begann somit mit der thermisch-mechanischen Kopplung.

Außerdem unterstützt die GRS die Projektkoordination bei der Findung und Herleitung von analytischen Lösungen für zweidimensionale Modelle.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Bearbeitung der einzelnen APs entsprechend der Vorhabensbeschreibung.

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

- keine -

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> 02 E 12032
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Methoden zur experimentellen und numerischen Analyse der geologischen Barriere eines Endlagers in tonreichen Sedimentgesteinsformationen (MAGNUS)		
<b>Zuordnung zum FuE-Förderprogramm:</b> C3: Sicherheitsnachweis; C3.1 „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> 01.07.2023 bis 31.12.2023	
<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.

### 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

#### AP 1: Probenahme und Probelagerung

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

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

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

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

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

#### AP 4: Dokumentation

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

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

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

Es ist im Rahmen des **UAP 1.1** das MMB-Experiment in der OPA-S durchgeführt worden. Gemäß der entwickelten Methodik sind in der ersten Phase des Experiments (Pre-Experiment-Monitoring) drei GRS-Mini-Piezometer (MP) in Teufen von 3m, 6m und 12m in einem Winkel von 45° relativ zur Schichtung installiert worden. Die Auswertung der Daten bestätigte zwar den hydraulischen Anschluss aller MPs (positive Porendrücke). Allerdings ist keine Einstellung des Gleichgewichtszustands im Berichtszeitraum festgestellt worden. Da sich die Raten, mit welchen sich die Porendrücke in den MPs bei 6m und 12m Teufe verändert haben, nur unwesentlich voneinander unterschieden haben, ist eine Mindestprobenahmetiefe von 6m bestimmt worden.

In der zweiten Phase des Experiments (eigentliches MMB-Experiment) sind fünf Bohrlöcher in Winkeln von 0°, 23°, 45°, 68° und 90° relativ zur Schichtung zum Zwecke der Probenahme aufgeföhren worden. Alle Bohrlöcher hatten eine Länge von 10m. Die aus Teufen ab 6m entnommenen Bohrkern sind gemäß der entwickelten Methodik innerhalb einer Stunde struktureologisch charakterisiert, konditioniert (u.a. unter Vakuumbedingungen verpackt) und in spezielle Transport- und Lagerbehälter (siehe UAP 1.2) verbracht worden.

In der dritten Phase des Experiments (Post-Experiment-Monitoring) wird die Reaktion des Gebirges auf die Entnahme des Probenmaterials mittels der MP analysiert.

Im Rahmen des **UAP 1.2** sind zwei Behältertypen zum Transport und zur (langfristigen) Lagerung von Bohrkernen aus tonreichen Sedimentgesteinsformationen konzipiert und gefertigt worden: Typ I ist ein aus Polyethylen-gefertigter Druckbehälter, in welchem der konditionierte Bohrkern platziert und mit einem hydrostatischen Druck von 4 bar belastet werden kann. Typ II ist ein Multikomponentensystem, in welchem Zurrgurte und (expansive) Polyurethan-Matten einen quasi-isotropen Spannungszustand entwickeln.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Bearbeitung der einzelnen APs entsprechend der Vorhabenbeschreibung.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

keine

<b>Auftragnehmer:</b> BGE TECHNOLOGY GmbH, Eschenstraße 55, 31224 Peine		<b>Förderkennzeichen:</b> 02 E 12042A	
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> 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			
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> C3: Sicherheitsnachweis; C3.2 Methodische Grundlagen der Nachweisführung			
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.11.2022 bis 31.10.2025		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2023 bis 31.12.2023	
<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

AP1: In diesem AP soll geklärt werden, wie sich Entwicklungen systematisch und nachvollziehbar ableiten lassen. Die vorhandene Methodik ist über gesteins- und konzeptspezifischen Anpassungen auch für Kristallingesteine anwendbar. Bei der Bewertung der Barrieren ist aufgrund der Klüftung allerdings auch das angrenzende Nahfeld zu berücksichtigen. Dafür werden die Initialbarrieren mit den umgebenden Komponenten (z.B. Versatz, Fluide, ALZ, Wirtsgestein) zu Initialgruppen zusammengefasst. Es wurden vier Initialgruppen für das mKBS-3 Konzept definiert: Einlagerungsbohrlöcher für hoch radioaktiv sowie für schwach und mittelradioaktive Abfälle, Kluftverschlüsse sowie Schacht- und Rampenverschlüsse. Für die ersten beiden Initialgruppen wurden bereits die Prozesse und ihre Einwirkung auf das Nahfeld der Barrieren in Ausprägungsdokumenten beschrieben. Für die Ableitung der zu erwartenden Entwicklung ist die Beschreibung der Ausprägung dieser Prozesse von wesentlicher Bedeutung.

AP2: Es soll bewertet werden, wie sich die Kombination der bisherigen Optionen (mKBS-3-Konzept, multiples ewG-Konzept und überlagernder ewG) auswirken würde und ob sie zu einem Robustheitsgewinn führt. GRS hat für das zu diesem Zweck erstellte Berechnungsmodell, welches durch die Wahl geeigneter Parameter für die Barrieren alle Konzeptkombinationen abbilden kann, erste Berechnungen am Basisfall durchgeführt, die in Projektgesprächen diskutiert wurden. Der Basisfall stellt das klassische mKBS-3-Konzept auf Basis generischer Eingangsparameter dar.

AP4: Ziel dieses APs sind Untersuchungen zu Optimierungsmöglichkeiten eines Endlagersystems gemäß EndlSiAnfV. Ein Schwerpunkt der Arbeiten zielte darauf ab, ein Verständnis zu entwickeln, was unter dem Optimierungsgedanken zu verstehen ist. Auf Basis der Verordnungen wurde eine Argumentationskette aufgebaut. Demnach verfolgt eine Optimierung durch Erhöhung der „Robustheit“ vor allem das Ziel, das Sicherheitskonzept bezüglich abweichender Entwicklungen zu verbessern, so dass über die Anforderung des „sicheren Einschlusses“ hinaus die Sicherheit des Endlagers **zusätzlich** erhöht wird. Im Umkehrschluss ist die **reine** Erfüllung der Anforderung des „sicheren Einschlusses“ auf Basis der zu erwartenden Entwicklung ein wesentliches Ziel bei der Entwicklung des Sicherheitskonzeptes sowie der damit verknüpften technischen Auslegung.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

AP1: Die restlichen Initialgruppen sollen beschrieben und mit den Informationen zum Fernfeld für die zu erwartenden Entwicklung kombiniert werden. Zudem ist eine Methodik für die Ableitung abweichender Entwicklungen zu beschreiben.

AP2: Die Berechnungen sollen um Konzeptkombinationen erweitert werden. Durch Parametervariationen, welche zusätzlich zu den zu erwartenden Entwicklungen auch abweichende Entwicklungen repräsentieren, soll der Robustheitsgewinn quantifiziert werden.

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

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Neuhaus et al. (2023): CHRISTA-III: Methodik zur Ableitung von Endlagerentwicklungen, Bewertung der Kombination von Einlagerungsoptionen, Modellierungskonzepte zur Bewertung der Integrität und Optimierungsmöglichkeiten im Endlagersystem. Projektstatusgespräch 2023, 06-07.11.2023, Karlsruhe. POSTER

<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 Einschusses unter Berücksichtigung von Optimierungsmaßnahmen (CHRISTA-III), Teilprojekt B		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> C3: Sicherheitsnachweis; C3.2 Methodische Grundlagen der Nachweisführung		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.11.2022 bis 31.10.2025	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2023 bis 31.12.2023	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 612.785,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Kim-Marisa Mayer	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Bei der Durchführung des Vorhabens werden folgende Arbeitspakete bearbeitet:

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

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

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP 2: Am 05.07., 15.8. und 16.10.2023 fanden Projektgespräche für AP 2 statt. In einem ersten Schritt wurden Transportpfade und Messpunkte festgelegt, die für den Vergleich der verschiedenen Kombinationen herangezogen werden sollen. Als Referenzkonzept wurde das mKBS-3-Konzept gewählt und erste Berechnungen durchgeführt und diskutiert. Die jährliche Anzahl der Atome (JAN) nach § 4 und die Dosis nach § 7 EndSiAnfV sowie die für die beiden Indikatoren wesentlichen Radionuklide wurden berechnet.
- AP 3: Auf dem Projekttreffen am 02.11.2023 wurde der Arbeitsstand vorgestellt und diskutiert. Es wurde ein 2D Modell aufgebaut und der Einfluss der Strömung und Permeabilität bewertet. Anschließend erfolgte der Aufbau eines 3D Modells und die Bewertung von Gittereffekten und des Transportverhaltens.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- AP 2: Es ist geplant, das Referenzkonzept (mKBS3-Konzept) mit dem mewG-Konzept und einem überlagernden Deckgebirge zu kombinieren und einen möglichen Sicherheitsgewinn zu quantifizieren. Als Ausgangspunkt wird die in AP 1 identifizierte erwartete Entwicklung unterstellt sowie der Zeitpunkt und die Anzahl ausfallender Behälter variiert. Eine Berechnung des sicheren Einschlusses erfolgt in einem ersten Schritt mit Claypos. Anschließend soll auch eine vergleichende Berechnung mit NaTREND erfolgen.
- AP 3: Es ist geplant, zusätzliche Variationsberechnungen mit verschiedenen Parametern und Szenarien, wie Permeabilitätsverteilung, und Strömungsfeld vorzunehmen.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e.V., Bautzner Landstrasse 400, 01328 Dresden		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 12052A</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Konkurrenz und Reversibilität bei Sorptionsvorgängen (Teilprojekt HZDR im Verbundvorhaben KuRSiv)		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> C1 Standortauswahl; C1.1 Geowissenschaftliche und geo-technische Methoden zur Standorterkundung (Feld und Labor), C1.2 Charakterisierung des Geosystems und Geosynthese, C1.3 Methodische Grundlagen eines Standortvergleichs		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.01.2023 bis 30.06.2026	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2023 bis 31.12.2023	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 557.539,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Vinzenz Brendler	

## 1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

## 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

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

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP1: Erste Untersuchungen zur Auflösung/Wiederbildung von K-Feldspat in Anwesenheit von Al. Schlussfolgerung: Desorptionsversuche und weitere Experimente mit Al-26 sind nötig, um Prozess zu verstehen.
- AP2: Untersuchung des Einflusses von  $\text{Al}^{3+}$  auf die Sorption von minoren Actiniden und deren Homolog  $\text{Eu}^{3+}$ . Durchführung von Sorptionsreihen ( $10\mu\text{M}$  Eu an K-Feldspat, welcher mit unterschiedlicher  $[\text{Al}^{3+}]$  (10, 50 und  $100\mu\text{M}$ ) vorbehandelt wurden).  
Reflektivitätsmessungen höherer Th-Konzentrationen in Abwesenheit von Nitrat wurden in Grenoble an der ESRF (ROBL Beamline) durchgeführt- Auswertung ausstehend. Erste AFM-Messungen zur Verifizierung früherer Ergebnisse erfolgten.
- AP3: Untersuchung möglicher Al-Sekundärphasen an K-Feldspat mit verschiedenen Methoden (Diffraktion und Mikroskopie: SXRD (Reflektivitätsmessungen), SEM/TEM und FIB) untersucht. Keine Sekundärphase nachgewiesen. Reflektivitätsmessungen, welche in Grenoble an der ESRF (ROBL Beamline) und in Chicago an der APS durchgeführt wurden, müssen noch vollständig ausgewertet werden.

#### Geplante Weiterarbeiten

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

### 4. Berichte, Veröffentlichungen

J. Lessing, J. Neumann, J. Lützenkirchen, F. Bok, V. Brendler, T. Stumpf, M. Schmidt. Retention of trivalent actinides (Am, Cm) and lanthanides (Eu) by Ca feldspars. safeND 2023: Forschungssymposium des BASE, 13.-15.09.2023, Berlin, Germany.

J. Lessing, J. Neumann, J. Lützenkirchen, F. Bok, V. Brendler, T. Stumpf, M. Schmidt. Influence of the Competition of Al on the Retention of Trivalent Actinides and their Homologues in Feldspar. Goldschmidt Conference 2023, 09.-14.07.2023, Lyon, France.

J. Lessing, J. Neumann, J. Lützenkirchen, F. Bok, V. Brendler, T. Stumpf, M. Schmidt. Influence of the Competition of Al on the Retention of Trivalent Actinides and their Homologues in Feldspar. 18th International Conference on the Chemistry and Migration Behaviour of Actinides and Fission Products in the Geosphere (Migration Conference), 24.-29.09.2023, Nantes, France.

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 12052B</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Konkurrenz und Reversibilität bei Sorptionsvorgängen (KuRSiv), Teilprojekt B		
<b>Zuordnung zum FuE-Förderprogramm:</b> C1 Standortauswahl; C1.1 Geowissenschaftliche und geo-technische Methoden zur Standorterkundung (Feld und Labor), C1.2 Charakterisierung des Geosystems und Geosynthese, C1.3 Methodische Grundlagen eines Standortvergleichs -Relevant für alle Wirtsgesteine		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.01.2023 bis 30.06.2026	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2023 bis 31.12.2023	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 721.047,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Susan Britz	

## 1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

## 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

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

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1: Die Bearbeitung des State-of-the-Art (SotA)-Berichts wurde vorangetrieben. Der Verbund hat sich zur Bearbeitung des SotA-Berichts verständigt, der, wenn möglich, später als Review Paper veröffentlicht werden soll. Literaturverzeichnisse, der aktuelle Arbeitsstand sowie Ergebnisse werden über die GRS-Cloud ausgetauscht.

AP2/3: Es wurde eine Routine zur schrittweisen Destillation von  $\text{HNO}_3$  mit der angeschafften Subboiling-Anlage CleanAcid CA3-125ml erstellt. Die Al-Gehalte in der Säure konnten substantiell reduziert werden. Unter Verwendung der aufgereinigten  $\text{HNO}_3$  wurden niedrigste Bestimmungsgrenzen für Al und stabile Kalibrationen mit der ICP-MS erreicht. Dieses ist Voraussetzung für die Analyse wässriger Lösungen von geplanten Sorptionsuntersuchungen mit Al.

Die experimentellen Arbeiten wurden mit den Verbundpartnern konkretisiert.

AP7: Diskussion der bereits geleisteten Arbeiten und des aktuellen Arbeitsstandes bei dem Kick-off-Treffen im Dezember 2023. Die Weiterführung des Lehrauftrags an der TU Clausthal wurde organisiert.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

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

AP2/3: Es sind Batchexperimente zur Quantifizierung der Sorption von Eu (teils auch Y) an Albit und Hämatit geplant. Im ersten Schritt wird untersucht, ob Albit unterschiedliche Sorptionscharakteristika im Vergleich mit Alkalifeldspäten (bzw. Kalifeldspat) und Plagioklasen (idealerweise Anorthit) aufweist.

Es wird untersucht, ob Al und Fe, welches inhärent auf der Mineraloberfläche von Quarz vorhanden ist, durch schrittweises Leaching signifikant reduziert werden kann. Al- und Fe-freie Quarzoberflächen sind erforderlich, um im Folgenden Al-/Fe-Sorptionsexperimente und kompetitive Sorptionsuntersuchungen durchführen zu können.

Die Minerale Albit, Hämatit und K-Feldspat werden gemahlen und u.a. durch XRD- und BET-Analysen charakterisiert. Weiterhin wird anvisiert, für Kalifeldspat feinste Partikel ( $\ll 1\mu\text{m}$ ) abzutrennen und für Untersuchungen mit der Schwingquarzmikrowaage am KIT zur Verfügung zu stellen.

AP7: Das nächste Arbeitstreffen findet in Braunschweig voraussichtlich im Mai 2024 statt. Der Lehrauftrag an der TU Clausthal im Sommersemester 2024 wird fortgeführt.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Institut für Nukleare Entsorgung, Karlsruher Institut für Technologie, Hermann-von-Helmholtz-Platz 1, 76344 Eggenstein-Leopoldshafen		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 12052C</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Konkurrenz und Reversibilität bei Sorptionsvorgängen (Teilprojekt KIT im Verbundvorhaben KuRSiv)		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> C1 Standortauswahl; C1.1 Geowissenschaftliche und geo-technische Methoden zur Standorterkundung (Feld und Labor), C1.2 Charakterisierung des Geosystems und Geosynthese, C1.3 Methodische Grundlagen eines Standortvergleichs		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.01.2023 bis 30.06.2026	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2023 bis 31.12.2023	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 473.763,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> <b>Dr. Johannes Lützenkirchen</b>	

## 1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

## 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

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

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

Zum 15.8.2023 wurde Dr. Hosseinimonjez eingestellt. Er führte zunächst zur Einarbeitung in die Thematik Literatur-Recherche und grundlegende experimentelle Arbeiten durch (pH-Messungen, Adsorptionsversuche, Zeta-Potential-Messungen). Mitte Oktober wurde die QCM durch den Hersteller am INE in Betrieb genommen. Im verbleibenden Teil des Zeitraums wurde das Gerät getestet und erste Versuche wurden durchgeführt. Das Strömungspotentialgerät wurde mit Zellen getestet, in denen QCM Kristalle vermessen werden können.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

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

AP4: Weitere Tests der Zelle für Strömungspotentialmessungen an QCM-Proben. Evaluierung des Designs einer Messzelle, mit der QCM und Strömungspotentialmessungen an identischen Proben möglich sind.

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

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

keine

<b>Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer:</b> Technische Universität Darmstadt, Institut für Angewandte Geowissenschaften, Fachgebiet Ingenieurgeologie, Schnittspahnstraße 9, 64287 Darmstadt		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 12062A</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Spannungsprognosen – Quantifizierung und Reduzierung von Ungewissheiten mit geomechanisch-numerischen Untergrundmodellen (SQuaRe), Teilprojekt A: Ungewissheiten durch Materialparameter, Diskretisierung, Initial- und Randbedingungen		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> C1: Standortauswahl, C1.1 Geowissenschaftliche und geotechnische Methoden zur Standort erkundung (Feld und Labor)		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.01.2023 bis 31.12.2025	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2023 bis 31.12.2023	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 258.500,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Andreas Henk	

### 1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

### 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

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

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

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

Von dem im ersten Halbjahr erstellten Referenzmodell wurden diverse Variationen des Rechengitters erstellt, um im Rahmen des Teilprojektes an der RWTH Aachen durchgeführte Untersuchungen zur Reduced Basis Methode zu unterstützen. So soll auch für diese Methode der Einfluss des Rechengitters untersucht werden. Weiterhin wurden Rechengitter für unterschiedliche Solver erstellt, um einen optimalen Workflow zu entwickeln. Auf Basis einer realen Modellgeometrie aus der nördlichen Schweiz wurde ein abstrahiertes 2-D Modell erstellt. Auf dessen Basis wurden mehrere Varianten mit einer unterschiedlichen Auflösung des Rechengitters (Mesh) erstellt. Weiterhin wurden unterschiedliche Strategien der Mesherstellung getestet. Für die Modelle wurden Materialeigenschaften als auch die Randbedingungen definiert, sodass die Modelle sich in einem Spannungszustand befinden, der mit der Referenzregion in der Nordschweiz vergleichbar ist. Die erste Modellserie ist gerechnet wurden. Im Dezember 2023 fand das zweite Projekttreffen in Präsenz (neben mehreren per Videokonferenz) in Darmstadt statt. Bei diesem haben die Arbeitsgruppen die bisherigen Ergebnisse diskutierten und die folgenden Arbeiten besprochen. Eine Publikation, die die bisherigen Projektarbeiten aller Verbundpartner zur Anwendung der Reduced Basis Methode auf mechanische Fragestellungen und die Quantifizierung von Ungewissheiten in Spannungsprognosen mit diesem Verfahren betrachtet, wurde vorbereitet.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Im ersten Halbjahr 2024 werden die Arbeiten zu den Modellen der Untersuchung des Einflusses des Rechengitters weitergeführt. Dabei liegt der Fokus auf der Auswertung der Ergebnisse und der Fertigstellung der Publikation. Es werden weitere Modellvarianten erstellt, um neu entstandene Fragestellungen beantworten zu können. Dazu zählen der Einfluss von Elementtyp und des Unterschiedes zwischen Elementen mit linearen oder quadratischen Ansatzfunktionen. Weitere Zuarbeiten für die Arbeitsgruppe, welche an der Reduced Basis Methode arbeitet, sind geplant. Der anschließende Fokus liegt auf der Vorbereitung der Arbeiten, der Modelle und Entwicklung von Konzepten, mittels deren die Optionen der Aufskalierung von Gesteinsparametern untersucht und verbessert werden können.

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

Das Projekt war mit einem Kurzvortrag und einem Poster an den Projektstatusgesprächen zu BMUV-geförderten FuE-Projekten zur Entsorgung radioaktiver Abfälle in Karlsruhe vom 6.+7. November 2023 vertreten. Das Poster hatte den Titel „Quantifizierung und Reduzierung der Ungewissheiten von Spannungsprognosen mit geomechanisch-numerischen Untergrundmodellen“. Andere Berichte oder Veröffentlichungen liegen zurzeit noch nicht vor.

<b>Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer:</b> Helmholtz Zentrum Potsdam Deutsches GeoForschungsZentrum GFZ, Telegrafenberg, 14473 Potsdam		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 12062B</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Spannungsprognosen – Quantifizierung und Reduzierung von Ungewissheiten mit geomechanisch-numerischen Untergrundmodellen (SQuaRe), Teilprojekt B: Bayesischer Ansatz zur Kalibrierung geomechanisch-numerischer Modelle mit Reduzierung von Ungewissheiten		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> C1: Standortauswahl; C1.1 Geowissenschaftliche und geotechnische Methoden zur Standort erkundung (Feld und Labor)		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.01.2023 bis 31.12.2025	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2023 bis 31.12.2023	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 366.885,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Oliver Heidbach	

### 1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

### 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

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

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

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

Leider war auch die zweite Ausschreibung nicht erfolgreich, so dass wir erst im November 2023 nach erneuter Ausschreibung der Doktorandenstelle endlich einen Kandidaten gewinnen konnten. Da der Kandidat noch seine Masterarbeit an der RWTH Aachen abschließen musste, konnte er die Stelle erst zum 15. Jan. 2024 antreten.

Im Rahmen eines zweiten Square Workshops Anfang Dezember an der TU Darmstadt haben wir gemeinsam mit den anderen Arbeitsgruppen den Aufbau des generischen Referenzmodells für AP1 sowie das Rechengitter, also die Diskretisierung in Finite Elemente, erweitert nachdem die ersten Tests mit dem initialen, recht einfachen Modell, sehr erfolgreich verliefen. Dieses Modell wird die Grundlage für die Entwicklung und Validierung von Methoden sein, die in jeweiligen APs der Teilprojekte bearbeitet werden. Die ersten Modellierungsergebnisse zeigen das grundsätzliche Potential der Reduced Basis Methode, da hiermit eine Beschleunigung der Rechenzeit um 4-6 Größenordnungen erzielt werden konnte ohne signifikanten Verlust an Präzision der Modellergebnisse. Mit dem daraus resultierenden Ersatzmodell können als eine hohe Anzahl von Simulationen durchgeführt werden mit denen der gesamte Parameterraum gescannt werden kann, um die der Ungewissheiten des Modells in den Materialeigenschaften und Randbedingungen für die Spannungsprognose zu quantifizieren.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Die Ergebnisse der ersten Studie waren auf technischer Seite so gut, dass wir gerade überlegen, ob der technische Aspekt der Umsetzung in einer Publikation vorgestellt werden soll. Es ist soweit wir wissen die erste Anwendung des Reduced Basis Ansatzes in einem Modell mit einer Tensor-Größe. Ein weiterer Fokus ist im ersten Halbjahr die Einarbeitung des Doktoranden sein und eine grundlegende Abschätzung wie die Ungewissheiten in den Modellkalibrierungsdaten (Daten zu den Magnituden der kleinsten und größten Horizontalspannung) in die Ungewissheit der Modellprognose beitragen. Wir wollen ebenfalls untersuchen wie und ob indirekte Spannungsdaten mit in die Modellkalibrierung einfließen können. Dabei wollen wir untersuchen, ob eine Kalibrierung an Punktdaten zielführend ist, oder ob nicht die Wahrscheinlichkeitsverteilung im Lösungsraum unter Berücksichtigung von weiteren indirekten Spannungsinformationen eine robustere und effizientere Methode ist.

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

Bisher liegen noch keine Berichte oder Veröffentlichungen vor.

<b>Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer:</b> RWTH Aachen University		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 12062C</b>	
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Spannungsprognosen – Quantifizierung und Reduzierung von Ungewissheiten mit geomechanischnumerischen Untergrundmodellen (SQuaRe) – Teilprojekt C			
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> C1: Standortauswahl, C1.1 Geowissenschaftliche und geotechnische Methoden zur Standort erkundung (Feld und Labor)			
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.12.2022 bis 30.11.2025		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2023 bis 31.12.2023	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 244.990,24 EUR		<b>Projektleiter:</b> Jan Florian Wellmann	

### 1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

### 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

Die RWTH Aachen arbeitet gemeinsam mit den Verbundpartner in AP 1 zur Definition eines generischen Referenzmodells, das als integrierte Modellierungs- und Simulationsplattform für alle Arbeitsgruppen fungiert, ferner in AP 5 an der Validierung des Modellierungskonzeptes und der entwickelten Modellierungswerkzeuge anhand eines realen Datensatzes aus der Nordschweiz. Der Schwerpunkt der Arbeiten liegt in AP 2 mit der systematischen Betrachtung von geometrischen Parametern auf die Ungewissheiten einer Spannungsprognose. Unter Verwendung des open-source Softwarepaketes GemPy werden einfache geologische Modelle erstellt und mit Hilfe weiterer open-source Pakete diskretisiert um dann für Spannungsprognosen verwendet werden zu können. Es wird untersucht welche Art von geometrischen Ungewissheiten den größten Einfluss auf die Spannungsprognosen hat. Desweiteren werden Ersatzmodelle mit Hilfe eines physikbasierten maschinellen Lernansatzes erstellt, um die Berechnung der Ungewissheiten der Spannungsprognosen zu ermöglichen. Dieser Schritt ist notwendig, da die einzelnen Simulationen eine zu lange Laufzeit haben um eine Ungewissheitsanalyse durchzuführen. In diesem Schritt liegt der Hauptfokus auf der Anwendung und Entwicklung von Methoden, die die physikalischen Eigenschaften der Modelle erhalten.

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

Im Projekt sind die bereits implementierten Ersatzmodelle für Spannungsprognosen erweitert wurden, sodass nun auch die kombinierten Einflüsse von Unsicherheiten (ergebend aus Materialeigenschaften, Grenzbedingungen und der Geometrie), berücksichtigt werden können. Desweiteren wurden globale Sensitivitätsstudien durchgeführt, um das Systemverständnis zu verbessern und zu evaluieren welche Unsicherheitsquellen den größten Einfluss auf die Spannungsprognose haben. Die durchgeführten Arbeiten werden zur Zeit für eine Veröffentlichung vorbereitet.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Im nächsten Schritt sollen die bereits erfolgten arbeiten in einem Journalartikel veröffentlicht werden. In darauf folgenden Schritten soll die Anwendung der Ersatzmodelle für eine vereinfachte Fallstudie getestet werden, um die darstellbare Komplexität zu beurteilen. Desweiteren soll die Einbindung der jetzigen und zukünftigen Ersatzmodelle in probabilistische Unsicherheitsanalysen erfolgen. Zudem soll der bisherige Erkenntnisgewinn genutzt werden, um ein generelles Vorgehen für die Fallstudie in der Schweiz zu entwickeln. Dies dient zur Quantifizierung von Unsicherheiten und besseren Vorhersagen der Spannungszustände im Endlagerbereich.

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

Im Zuge des Projektes sind im Berichtszeitraum keine Berichte oder Publikationen veröffentlicht worden.

<b>Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer:</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-Programm:</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> 01.07.2023 bis 31.12.2023	
<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  $> 10^{-17}$  m<sup>2</sup> 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;
- Verständnisentwicklung zur vermuteten Wirkung des Zuschlaganteils Hartgestein auf Expansionsdruckentwicklung/-verbleib und Relaxationsverhalten des C3-Betons gegenüber anderen 3-1-8-Rezepturtypen (A1, DBM2, C3-Zement); dabei Substitution der Rezepturkomponente Quarzmehl unter Erhalt des langzeitlichen Kontaktdruckverhaltens;
- Ermittlung einer geomechanischen Datenbasis, u.a. Festigkeits- und Permeabilitätsverhalten sowie Kompaktionseigenschaften für die Prognose der Langzeitwirkung des C3-Beton-Dichtelements.

## 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

AP1: Weiterer Verlauf der Kontaktdruckentwicklung

AP2: Untersuchung der Schwankungsbreite der C3-Rezeptur

AP3: Neuformulierung der Rezeptur

AP4: Berichtserstellung

Die Arbeitspakete 2, 3 und 4 werden gemeinschaftlich unter Beteiligung des Verbund-partners HZDR bearbeitet.

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1: Das Monitoring des in-situ-Großbohrlochversuch in der Grube Teutschenthal wurde fortgesetzt (alle Spannungen, Temperatur, Standortfeuchte). Es zeigt sich nach nun mehr als 4 Jahren (ca. 1600 Tage) nach dem Einbau ein sich bei 4,0 – 4,5 MPa einpegelnder Kontaktdruck, welche als sich eingestellter Gleichgewichtszustand zwischen Bauwerk und Gebirge interpretiert wird.

Für die geplante Lösungsdruckbeaufschlagung ist ein neuer Packer einsatzbereit.

AP2: An zwei Anmischterminen (für TZF40 bzw. TZF70) wurden alle Probe- und Messzellen mit den vier Rezepturvarianten RV1-RV4 befüllt und das Labor-Monitoring-Programm gestartet (Druck, Phasenbestand, Temperatur). Bereits nach den ersten Wochen war auffällig, dass keine kontinuierlich zunehmende Druckentwicklung nach der ersten thermisch induzierten zu verzeichnen war, da unerwartet bereits die 3-1-8-Phase primär mit entstanden war. Es wurde mit systematischen Recherchen zu bisherigen Messergebnissen von 3-1-8-Rezepturtypen und dem Vergleich und Überprüfung aller Rezepturkomponenten herausgefunden, dass offensichtlich die Zusammensetzung der Anmischlösung entscheidend ist. Mit der eingesetzten 5 molalen  $MgCl_2$ -Lösung (entsprechend der Stöchiometrie in der 3-1-8-Phase) und keinen weiteren Nebenbestandteilen, wie geringe Konzentrationen an Sulfat etc., bildete sich primär nicht nur die 5-1-8-, sondern auch die 3-1-8-Phase (Temp.-abhängig). Das Potential für deren Sekundärkristallisation ist damit nur noch anteilig vorhanden, wie die Druckmessdaten zeigten. Mit diesem Erkenntnisgewinn und der Notwendigkeit, das Messprogramm unter Neuherstellung von RV1-RV4 mit einer entsprechenden Anmischlösung nochmals zu starten, wurden das Monitoring-Programm TZF40 beendet (für TZF 70 zu Beginn 2024).

AP3: Mit feingemahlenem, natürlichem Anhydrit konnte unter Erhalt der Suspensionsstabilität das Quarzmehl in der MgO-C3-Betonrezeptur substituiert werden. Das Labor-Monitoring-Programm für TZF40 und TZF70 wurde gestartet. Zur Herstellung der Proben wurde bereits eine entsprechende Anmischlösung (s. AP2) verwendet. Es bildet sich mit den bisherigen Messdaten die erwartete Phasenbestands- und damit Druckentwicklung ab.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

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

Beauftragung des Feuchtemonitoring durch die im Großbohrlochversuch mit eingebauten TDR-Kabelsensoren (ELSA II) durch ISU Karlsruhe; Beginn der Lösungsdruckbeaufschlagung.

AP2: Aufbereitung der Druckmesszellen nach Auspressung der Probekörper vom IfG Leipzig. Neuanmischung der Rezepturen R1-R4 mit entsprechend anderer Anmischlösung und Befüllung der aufbereiteten Probe- und Messzellen für Neustart des Labor-Monitorings im TZF 40 und TZF 70 im 1. Quartal 2024.

AP3: Fortsetzung Labor-Monitoring-Programm (Druck, Phasenbestand, Temperatur).

### 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 Verschluss- element 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> 01.07.2023 bis 31.12.2023	
<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 Verständnisenwicklung zur Aufrechterhaltung des langanhaltenden Kontaktdruckes in Abhängigkeit von den Rezepturkomponenten und deren möglicher Schwankungsbreite ist Gegenstand dieses Verbundvorhabens.

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

## 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

Hauptvorhaben:

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

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

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

AP2.2 Optimierung der Probengröße,  
Algorithmusentwicklung zur Korn-Korn-Koordination.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

AP2.2 Weiterentwicklung des Algorithmus und Parametrisierung Korn-Korn-Koordination.  
AP2.5  $\mu$ CT-Untersuchungen an MgO-C3-Proben, Probenübernahme Ende Januar 2024.

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

keine

<b>Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer:</b> TU Clausthal - Lehrstuhl für Geomechanik und multiphysikalische Systeme		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 12082</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Langzeitsicheres Abdichtungselement aus Salzschnittblöcken - Durchführung, Auswertung und Reanalyse von THM-Versuchen unter triaxialer Extensionsbeanspruchung (SSBVIER)		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte; Endlagertechnik und (geo-)technische Barrieren; C2.3 Geotechnische und technische Barrieren		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.01.2023 bis 31.12.2024	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2023 bis 31.12.2023	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 243.874,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> apl. Prof. Dr.-Ing. habil. Uwe Düsterloh	

## 1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

## 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

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

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP1: Angebotseinholung, Lieferanfragen bei verschiedenen Institutionen  
AP2: Herstellung der Salzschnittblöcke für einen vierten Prüfkörper (Durchmesser = 0,55 m und Höhe = 1,5 m) mit einer Fugenbreite von 0,1 mm (ohne Salzgrusfugenfüllung)  
AP3: Fortführung des dritten Prüfkörpertests mit Salzschnittblock-Konfiguration mit einer Fugenbreite von 5 mm und Salzgrusfugenfüllung: Analyse der Permeabilität für variierte mechanische und hydraulische Beanspruchungen.  
AP4: Rechnerische Backanalyse des dritten Prüfkörpertests mit der Salzschnittblock-Konstruktion mit einer Fugenbreite von 5 mm und Salzgrusfugenfüllung  
AP5: -

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1:  
AP2: Weitere Herstellung von Salzschnittblöcken für den vierten Prüfkörper (Durchmesser = 0,55 m und Höhe = 1,5 m) mit einer Fugenbreite von 0,1 mm (ohne Salzgrusfugenfüllung); Bestellung der Salzbetonschalung; Bestellung Salzschnittblöcke  
AP3: Fortsetzung des dritten Prüfkörpertests (Salzschnittblock-Konfiguration mit einer Fugenfüllung)  
AP4: Reanalyse und Abschluss Versuch 3; Aufbau und Versuchsbeginn Versuch 4 (mit Salzbetonschalung)  
AP5: -

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

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

<b>Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer:</b> Leibniz Universität Hannover		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 12092</b>	
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Recherche und Beschreibung für das Endlagerbehältersystem in Frage kommende Materialien (ElaBeMa)			
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Projektförderprogramm des Bundesministeriums für Wirtschaft und Energie zur Sicherheitsforschung für kerntechnische Anlagen 2021–2025, C2 Sicherheits- und Endlagerkonzepte; Endlagertechnik und (geo-)technische Barrieren, FuE Feld C2.3 Geotechnische und technische Barrieren			
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.01.2023 bis 30.06.2024		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2023 bis 31.12.2023	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 109.102,00 EUR		<b>Projektleiter:</b> Dr.-Ing. Thomas Hassel	

## 1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

## 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

### 1. Literaturrecherche und Auswertung zu Behältermaterialien

#### 1.1. Recherche Werkstoffsysteme

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

#### 1.2. Recherche Produktionstechnik

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

#### 1.3. Recherche Einflussparameter

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

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Die Einstellung eines wiss. Mitarbeiters war erst im November 2023 möglich, daher wurde das Vorhaben später als ursprünglich geplant begonnen.

Zunächst wurde eine Literaturübersicht zur Werkstoffwahl und von Mehrkriterien-Entscheidungsfindung erstellt. Basierend darauf wurden die Ziele und Anforderungen an das gesamte Endlager als System und den Endlagerbehälter als Komponente dieses Systems erarbeitet. Betrachtet wurde hierbei der gesamte Lebenszyklus des Endlagerbehälters von der Produktion bis zum Nachbetrieb des Endlagers.

Grundlage für die in Anforderungen und Randbedingungen zu überführenden Informationen stammen aus gesetzlichen Vorgaben, Studien zu Endlagerbehältern, Geologie der in Frage kommenden Wirtsgesteine und Berichten zum End- und Zwischenlagerbau. Die Erarbeitung der Anforderungen ist zugehörig zu Arbeitspaket 1.3, der Ermittlung der möglichen Einflussgrößen auf den Endlagerbehälter. Zudem besteht durch die Recherche bereits ein Überblick über die möglichen Werkstoffsysteme aus Arbeitspaket 1.1. Eine entsprechende strukturierte Literatursammlung wurde aufgebaut.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Die erarbeiteten Anforderungen und Randbedingungen an den Endlagerbehälter werden methodisch bezüglich des Behältermaterials weiter spezifiziert. Sie werden hierzu nach mechanischen, chemischen, thermischen, ökologischen, ökonomischen sowie technischen Anforderungen und Randbedingungen kategorisiert und hierarchisiert und ihren Funktionsorten zugeordnet.

In einem ersten Schritt wird eine erste Auswahl bezüglich der zu betrachtenden Werkstoffgruppen getroffen. Hierbei soll neben Anforderungen und Randbedingungen auch der Überblick über die möglichen Werkstoffsysteme aus Arbeitspaket 1.1 angewendet und abgeglichen werden.

In einem zweiten Schritt sollen den ausgewählten Gruppen zugehörige Werkstoffe bezüglich ihrer Eignung, anhand der erarbeiteten Anforderungen, näher betrachtet und bewertet werden. Hierbei wird insbesondere beachtet, dass nicht nur singuläre Werkstoffe, sondern auch Werkstoffsysteme ein besonderes Potential bieten können. Die Produktionstechnik aus Arbeitspaket 1.2 und die daraus abgeleiteten Anforderungen sollen in diesem Schritt Anwendung finden. Die Ergebnisse dieses zweiten Schrittes sollen tabellarisch dokumentiert werden.

Am Ende dieses Prozesses soll eine Werkstoffauswahl stehen, die Anforderungen und Randbedingungen erfüllt. Dies bedeutet, dass das oder die ausgewählten Werkstoffe/Werkstoffsysteme die Schutzfunktion des Endlagerbehälters sicherstellen können und es möglich ist diesen nach heutigem Stand der Technik zu fertigen.

Es wurde ein Antrag auf kostenneutrale Verlängerung bis zum 30.06.2024 gestellt und bewilligt.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Hassel, T. (2023): Concretisation of host-rock-dependent canister concepts through the development of a consistent but variable multi-barrier system for the future engineered barrier system, *Saf. Nucl. Waste Disposal*, 2, 43–44, <https://doi.org/10.5194/san>

<b>Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer:</b> TU Braunschweig, Postfach 3329, 38023 Braunschweig		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 12102</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Entwicklung einer selbstlernenden Modellierungsmethodik zu geomechanischen und geotechnischen Prozessen am Beispiel der Planungs- und Auffahrungsphase einer Einlagerungsstrecke eines Tiefenlagers (SEMOTI)		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Nukleare Sicherheitsforschung - Reaktorsicherheits- und Entsorgungsforschung Endlagerung C3 – Sicherheitsnachweis, FuE Feld C3.3 Werkzeuge der Sicherheitsanalysen		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.05.2023 bis 30.04.2026	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2023 bis 31.12.2023	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 999.050,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Univ.-Prof. Dr.-Ing. J. Stahlmann	

## 1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

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

## 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

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

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

AP2: Erstellen eines virtuellen Demonstrators (IGG)

AP3: Parametrisierung des virtuellen Demonstrators (IGG)

AP4: Maschinelles Lernen mittels Gaußprozessen (IRMB, IDS)

AP5: Implementierung eines Optimierungsprozesses für die Planungsphase (IDS)

AP6: Implementierung eines Kalibrierungsprozesses für die Auffahrungsphase (IRMB)

AP7: Sensitivitätsbetrachtung (IGG, IRMB, IDS)

AP8: Administrative Arbeiten

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Das Institut für Geomechanik und Geotechnik (IGG) hat auf Grundlage einer Literaturrecherche eine Datenbank mit Material- und Systemparametern für den virtuellen Demonstrator einer Einlagerungsstrecke in Steinsalz erstellt (AP1). Ebenfalls wurde ein funktionstüchtiges numerisches Modell einer Einlagerungsstrecke im Wirtsgestein Steinsalz generiert und erfolgreich getestet (AP2). Im Rahmen des AP3 wurde der virtuelle Demonstrator anschließend anhand von Geometrie- und Stoffmodellvariablen parametrisiert. Die geometrische Parametrisierung erfolgt dabei mit der CAD-Software Rhino7 und die automatische Diskretisierung des Kontinuums mit dem Rhino7-Plugin Griddle2.0.

Durch Anwendung des maschinellen Lernens mittels Gaußprozesse hat das Institut für rechnergestützte Modellierung im Bauingenieurwesen (IRMB) zusammen mit dem Institut für Dynamik und Schwingungen (IDS) die Kalibrierung ausgewählter Parameter des Stoffmodells TUBSSalt für Steinsalz anhand des parametrisierten virtuellen Demonstrators erfolgreich getestet. Zu diesem Zweck hat das IGG generische Messdaten sowie Trainingsdaten erzeugt, um eine erste Anwendbarkeit eines automatisierten Kalibrierungsprozesses in AP6 zu erproben.

Weiterhin hat das IRMB in AP7 eine globale Sensitivitätsanalyse durch Sobol-Indizes durchgeführt, mit dessen Hilfe die relevanten Stoffmodellparameter für den Kalibrierungsprozess identifiziert werden konnten.

Um die generische Kalibrierung durch die einer in-situ Einlagerungsstrecke zu ersetzen, hat sich die BGE bereit erklärt Monitoringdaten aus Steinsalzformationen zur Verfügung zu stellen. Es wurden Gespräche mit der BGE geführt, um gemeinsam die Anforderungen an die Messdaten und zugehörigen Standortinformationen zu erörtern.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Die Datenbank zu Tiefenlagerkonzepten und Systemeigenschaften aus AP1 und der parametrisierte virtuelle Demonstrator aus AP3 sollen in einem nächsten Schritt über eine Python-Schnittstelle miteinander gekoppelt werden, sodass Material- und Systemparameter direkt aus der Datenbank an das numerische Modell in FLAC3D kommuniziert werden.

Weiterhin wird an der Umsetzung der Durchführung von Simulationsrechnungen mit FLAC3D auf der hochschulinternen Hochleistungsrechneranlage Phoenix-Cluster gearbeitet. Sobald die Datenbank mit dem parametrisierten virtuellen Demonstrator gekoppelt ist und Simulationen des komplexen Modells auf dem Phoenix-Cluster durchgeführt werden können, wird mit der Implementierung des automatisierten Optimierungsprozesses begonnen (AP5).

Mithilfe von Monitoringdaten der BGE, die aus Konvergenz- und Extensometermessungen bestehen und in Kürze zur Verfügung stehen werden, soll gemäß AP6 das numerische Modell der zugehörigen Strecke mittels Gauß-Prozessen kalibriert werden. Dazu wird zunächst vom IGG der virtuelle Demonstrator an die in-situ Bedingungen angepasst und geeignete Monitoringdaten in Absprache aller beteiligten Institute ausgewählt. Das IDS und IRMB arbeiten an einem Lernverfahren für die Gaußprozess-Regression, welches die automatische Auswahl von relevanten Parameterstützstellen für die Kalibrierung, Optimierung und Verbesserung der Surrogatmodelle ermöglicht.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e.V., Bautzner Landstrasse 400, 01328 Dresden		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 12112A</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Systematic sensitivity analysis for mechanistic geochemical models using field data from crystalline rock (SANGUR), Teilprojekt A		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> C3 Sicherheitsnachweis; C3.1 Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-)Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung, C3.3 Werkzeuge der Sicherheitsanalysen		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.02.2023 bis 31.01.2026	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2023 bis 31.12.2023	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 736.940,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Vinzenz Brendler	

## 1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

## 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

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

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP2: Überarbeitung eines Workflows zur Berechnung von Verteilungskoeffizienten (basierend auf mechanistischem smart  $K_d$ -Konzept):
- Modul Lithologie: Diskussion existierender geostatistischer Ansätze, erste Tests in Python zur Verwendung des Multinary Random Fields Ansatzes
  - Modul Geochemie: erste Tests zur Eignung geochemischer Speziationscodes (PhreeqC; GWB) für den Workflow.
- AP3: Sichtung bestehender Parameterlisten und Diskussion der Relevanz verschiedener Parameter hinsichtlich der vorliegenden Fragestellungen.
- Identifizierung des optimalen Sampling Schemas für Kompositionsdaten (Compositional Data): Anwendung der Sensitivitätsanalyse auf einen einfachen Testfall.
- AP7: 6. - 7.11.2023 Projektstatustreffen, Karlsruhe – zwei Poster präsentiert (IRE, TUC)  
05.12.2023 Online-Meeting mit TUC und UJV – Austausch aktueller Status  
14.12.2023 Online-Meeting mit UJV – Proben- und Datenverfügbarkeit

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- AP2: Erweiterung des smart  $K_d$ -Workflows: Detailliertere Strukturierung und Abstraktion seiner Module, Ableitung von Sensitivitäts- und Unsicherheitsanalysen.
- AP3: Erweiterung der Parametrisierung auf Ionenaustauschreaktionen, Überprüfung von Löslichkeitskonstanten für Feldspäte und Glimmer
- Schließen kritischer thermodynamischer Datenlücken anhand von Literaturwerten
- AP6: In enger Zusammenarbeit zwischen TUC und HZDR Bestimmung relevanter Mineralzusammensetzungen (als compositional data ausgedrückt)
- AP7: Monatliche Online-Meeting zwischen HZDR, TUC und UJV
- 13.-15.02.2024: Besuch von TUC und HZDR bei UJV Rez, in Bukov URL und Jozef Gallery URL (Organisiert von UJV)
- 30.-31.05.2024: Besuch von HZDR und UJV bei TUC

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

- Pospiech, S., Duckstein, A., Brendler, V. (2023). *Geostatistical Workflow & Model Parametrization in Crystalline Host Rocks*. Poster. Projektstatusgespräch 2023 zu BMUV-geförderten FuE-Projekten zur Entsorgung radioaktiver Abfälle, Karlsruhe 06.11. – 07.11.2023.
- Duckstein, A. (2023). *Geochemical heterogeneity and parameter variances: relevance, relation, and reduction*. Talk. PhD students seminar FWO, Scheffau, October 15-21, 2023

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Institut für Endlagerforschung, Technische Universität Clausthal, Adolph-Roemer-Str. 2a, 38678 Clausthal-Zellerfeld		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 12112B</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Systematic sensitivity analysis for mechanistic geochemical models using field data from crystalline rock (SANGUR), Teilprojekt B		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> C3 Sicherheitsnachweis; C3.1 Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-)Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung, C3.3 Werkzeuge der Sicherheitsanalysen		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.02.2023 bis 31.01.2026	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2023 bis 31.12.2023	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 426.876,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> <b>Prof. Dr. Klaus-Jürgen Röhlig</b>	

## 1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

## 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

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

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1: Literaturzusammenstellung der verfügbaren Sensitivitätsanalysemethoden

AP4: Erste Software Prototype

Anwendung der Sensitivitätsanalyse auf einen einfachen Testfall.

AP7: 6. - 7.11.2023 Projektstatustreffen, Karlsruhe – zwei Poster präsentiert (IRE, TUC)

05.12.2023 Online-Meeting mit IRE und UJV – Austausch aktueller Status

### 4. Geplante Weiterarbeiten

AP1: Identifikation spezifischer Anforderungen geochemischer Modellierung

AP4: Erhöhung der Nutzerfreundlichkeit, Implementierung weiterer Sensitivitätsmethoden

AP6: In enger Zusammenarbeit zwischen TUC und IRE Bestimmung relevanter Mineralzusammensetzungen (als compositional data ausgedrückt)

AP7: Monatliche Online-Meeting zwischen IRE, TUC und UJV

13.-15.02.2024: Besuch von TUC und IRE bei UJV Rez, in Bukov URL und Jozef Gallery URL (Organisiert von UJV)

30.-31.05.2024: Besuch von IRE und UJV bei TUC

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

- Plischke, E., Abdelhafiz, M., Röhlig, K.-J. (2023). *Sensitivity Analyses of Hydrogeochemical Models: Methods & Challenges*. Poster. Projektstatusgespräch 2023 zu BMUV-geförderten FuE-Projekten zur Entsorgung radioaktiver Abfälle, Karlsruhe 06.11. – 07.11.2023.

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 12122A</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Stabilität von Mineralphasen des Eisens im Nahfeld eines Endlagers (STAMINA), Teilprojekt A		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> C3: Sicherheitsnachweis; C3.1: Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-) Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.11.2022 bis 31.03.2026	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2023 bis 31.12.2023	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 522.440,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Helge C. Moog	

## 1. Vorhabenziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

## 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

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

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1: für die System Fe(II)-K-Cl-H<sub>2</sub>O(l) und Fe(II)-Mg-Cl-H<sub>2</sub>O(l) wurden isopiestiche Versuche bei den Temperaturen 40, 60 und 90 °C durchgeführt. Das System Fe(II)-K-Cl-H<sub>2</sub>O(l) wurde mit je 3 Linien bei 40, 60 und 90 °C mit sehr guten Ergebnissen abgeschlossen. Beim System Fe(II)-Mg-Cl-H<sub>2</sub>O(l) konnten die Versuche bei 40°C bereits beendet werden. Die Isopiestic des Systems Fe(II)-Ca-Cl-H<sub>2</sub>O(l) wurde vorbereitet.

AP2: Versuche im System Fe(II)-Mg(II)-Cl-OH-H<sub>2</sub>O ergaben im Gegensatz zu den Erwartungen keinen Hinweis auf die Bildung fester Lösungen des Typs (Fe,Mg)<sub>2</sub>(OH)<sub>3</sub>Cl (Hibbingit). Die Versuchsergebnisse lassen sich stattdessen durch zwei separate Fe(II) – und Mg-Phasen erklären. Ein ähnliche Beobachtung wurde im System Fe(II)-Mg(II)-Cl-OH-H<sub>2</sub>O gemacht. Die Auswertung deutet darauf hin, dass in diesem System über einen weiten Bereich an Fe/Mg-Verhältnissen Chukanovit auftritt (Fe<sub>2</sub>(OH)<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>) und daneben eine Mg-reiche Phase. Weitere Aufklärungen werden über röntgendiffraktometrische Messungen erfolgen.

Ein Teil der Löslichkeitsversuche im System NaOH-Fe(OH)<sub>2</sub>-H<sub>2</sub>O muss wegen angenommener Photooxidation wiederholt werden.

AP4: Das Best Practice-Dokument wurde fortgesetzt

AP5: Für das Dokument zur Datenselektion wurde eine Gliederung erstellt und soweit erforderlich Zuständigkeiten definiert.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

AP1: Fortführung der isopiestiche Versuche für die Systeme Fe(II)-Mg-Cl-H<sub>2</sub>O(l) und Fe(II)-Ca-Cl-H<sub>2</sub>O(l) bei 40, 60 und 90°C.

AP2: Fortführung der Löslichkeitsversuche in Systemen mit Fe(OH)<sub>2</sub>

AP3: Fortführung des Best Practice Dokuments

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

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

<b>Auftragnehmer:</b> Karlsruher Institut für Technologie (KIT) Institut für Nukleare Entsorgung (INE)		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 12122B</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Stabilität von Mineralphasen des Eisens im Nahfeld eines Endlagers (STAMINA), Teilprojekt B		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> C3: Sicherheitsnachweis; C3.1 „Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-)Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung“		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.04.2023 bis 31.03.2026	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2023 bis 31.12.2023	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 239.471,61 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Marcus Altmaier	

## 1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

## 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

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

AP 1: Speziation.

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

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

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

AP 5: Dokumentation der Datenselektion.

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP 1: Keine Aktivitäten im Berichtszeitraum. Der Start des AP 1 ist von KIT-INE für das Jahr 2024 geplant.

AP 2: Es wurden die nachfolgend beschriebenen Arbeiten durchgeführt: (i) Synthese von  $\text{Fe}(\text{OH})_2(\text{cr})$ ,  $\text{Fe}_2(\text{OH})_3\text{Cl}(\text{s})$  und verschiedener Fe(III)-Oxo-Hydroxid-Festphasen; (ii) Experimentelle Charakterisierung der synthetisierten Festphasen mit Hilfe von XRD Messungen; (iii) Definition der experimentellen Randbedingungen für die Löslichkeitsexperimente mit Fe(II) in KCl-KOH, NaCl-NaOH und  $\text{CaCl}_2\text{-Ca}(\text{OH})_2$  Systemen sowie Initiation der Löslichkeitsexperimente in KCl-KOH. (iv) Vorläufige Löslichkeitsexperimente im System  $\text{Fe}^{3+}\text{-Ca}^{2+}\text{-H}^+\text{-OH}^-\text{-Cl}^-\text{-H}_2\text{O}(\text{l})$  zur Vorbereitung der geplanten EXAFS Untersuchungen (siehe AP 1).

AP 3: Keine Aktivitäten im Berichtszeitraum. Der Start des AP 3 ist von KIT-INE für das Jahr 2024 geplant.

AP 4+5: Keine Aktivitäten im Berichtszeitraum.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

AP 1: (i) Initiierung von EXAFS Untersuchungen im  $\text{Fe}^{3+}\text{-Ca}^{2+}\text{-H}^+\text{-OH}^-\text{-Cl}^-\text{-H}_2\text{O}(\text{l})$  System zur Charakterisierung der wässrigen Eisenspeziation mit Fokus auf potentiell auftretende ternäre  $\text{Ca}(\text{II})\text{-Fe}(\text{III})\text{-}(\text{OH})(\text{aq})$  Komplexe, sowie Analyse der Löslichkeitsbestimmenden Festphasen. (ii) Bewertung der Machbarkeit von EXAFS Untersuchungen im  $\text{Fe}(\text{II})\text{-Fe}(\text{III})\text{-OH-CO}_3$  System zur Charakterisierung der wässrigen Eisenspeziation. (Präparation der Proben erfolgt durch den Projektpartner GRS).

AP 2: (i) Weiterführung der Löslichkeitsexperimente mit  $\text{Fe}(\text{OH})_2(\text{cr})$  in KCl-KOH, NaCl-NaOH und  $\text{CaCl}_2\text{-Ca}(\text{OH})_2$  Systemen; (ii) Initiation der Löslichkeitsexperimente mit  $\text{Fe}_2(\text{OH})_3\text{Cl}$  analog zum oben skizzierten Vorgehen; (iii) Weiterführung der Löslichkeitsexperimente im  $\text{Fe}^{3+}\text{-Ca}^{2+}\text{-H}^+\text{-OH}^-\text{-Cl}^-\text{-H}_2\text{O}(\text{l})$  System; (iv) Vorbereitung und Planung der Löslichkeitsexperimente mit Fe(III) aus der Untersättigung in Abwesenheit und Anwesenheit von Carbonat (v) Initiierung der Synthese von Fe(II)- und Fe(III)-Silikat Festphasen.

AP 3: (i) Erstellung eines thermodynamischen SIT- Modells für das Fe(II) System auf Grundlage der vorhandenen experimentellen Daten; (ii) Anfertigung eines Manuskripts zur Löslichkeit und Thermodynamik von  $\text{Fe}(\text{OH})_2(\text{cr})$  und  $\text{Fe}_2(\text{OH})_3\text{Cl}$ .

AP 4+5: Keine Aktivitäten geplant.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Arbeiten von KIT-INE wurden im Rahmen des „Projektstatusgespräch 2023 zu BMUV-geförderten FuE-Projekten zur Entsorgung radioaktiver Abfälle“ (06.11.2023 – 07.11.2023 in Karlsruhe) im Rahmen einer Posterpräsentation vorgestellt.

<b>Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer:</b> BGE TECHNOLOGY GmbH		<b>Förderkennzeichen:</b> 02 E 12133A
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Weiterführung der Entwicklung von Ausbau von Grubenbauen für ein HAW-Endlager in Tongestein (AGEnT002), Teilprojekt A		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm</b> C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte; Endlagertechnik und (geo-)technische Barrieren; C2.1 - Sicherheits- und Endlagerkonzepte		
<b>Laufzeit des Vorhabens</b> 01.07.2023 bis 31.08.2025	<b>Berichtszeitraum</b> 01.07.2023 bis 31.12.2023	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 386.567,93 EUR	<b>Projektleiter:</b> Philipp Herold	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1: Der Verbundpartner DMT GmbH & Co. KG ist federführend im AP1 und führt den Großteil der Arbeiten aus. Erster Schwerpunkt war die Zusammenstellung eines geeigneten Parametersatzes zur Beschreibung der Eigenschaften des Tongesteines. Zu der Übersichtstabelle aus dem Vorhaben AGENT wurden weitere bzw. neuere Literaturquellen zugefügt und drei unterschiedliche Parametersätze für "günstige", "durchschnittliche" und "ungünstige" Gebirgseigenschaften definiert. Die Kennwerte orientieren sich an verfestigtem Tonstein wie beispielsweise Opalinuston oder Callovo-Oxfordian. Geringfeste, tertiäre Tone wurden aus den Überlegungen ausgeklammert. Die Parametersätze enthalten (anisotrope) Gesteinseigenschaften (E-Modul und Querdehnzahl) und definieren ebenso Eigenschaften der Matrix und der Schichtung im Gebirgsverbund (jeweils Kohäsion, Reibungswinkel, Zugfestigkeit, Dilatanzwinkel und entsprechende Restwerte im Nachbruchbereich).

Ergänzend wurden Bewertungskriterien für die Eignung der Ausbaukonzepte definiert. Die Kriterien wurden so gewählt, dass sie auch in den weiteren Arbeitspaketen angewendet werden können die Belastung bzw. Schädigung des Gebirges um die Strecken zu bewerten. Die drei wesentlichen Kriterien sind:

- Abstand zwischen den Auflockerungszonen zweier benachbarten Strecken (Schädigungsbasiertes bzw. dilatanzbasiertes Kriterium)
- Konvergenzentwicklung um eine Strecke (Deformationskriterium / Gebrauchstauglichkeitskriterium)
- Ausnutzungsgrad bis zum Bruch (Spannungsbasiertes Kriterium)

AP2: Die Geometrie der sich kreuzenden Strecken ist aus dem Vorhaben AGENT bekannt und wurde für die Modellerstellung genutzt. Im Modell wird ein Abzweig einer Strecke von einer Hauptstrecke abgebildet (T-förmig). Das Modell beinhaltet somit drei Streckenteile. Das Modell bildet das Gebirge sowie Tübbingschale und Hinterfüllung ab.

Vorbereitend zu der Dimensionierung der Hauptstrecke wurde am Institut für Statik und Dynamik der TU Braunschweig eine Studienarbeit initiiert („Modellierung und Simulation von Tunneltragwerken für radioaktive Endlagerstättenauslegung“). Schwerpunkt ist die Definition von Lastkombinationen nach EC2 und die Tragwerksanalyse einfacher Modellgeometrien (nur Strecke) und ohne Hinterfüllung in der Software SOFISTIK. Die Einwirkungen aus dem Gebirge werden aus den geomechanischen Modellen abgeleitet. Der Parametersatz „mittel“ wurde angewendet.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

AP2: Aufbauend auf der Tübbing-Dimensionierung in AP1 wird die Dimensionierung des Streckenkreuzes weitergeführt. Im nächsten Schritt wird ein technischer Entwurf der Streckenkreuze entworfen und ein Bauablaufkonzept entwickelt. Die Studienarbeit und der vergleichende Einsatz von SOFISTIK wird mit einer Masterarbeit am Institut für Statik und Dynamik der TU Braunschweig weitergeführt. Die Einwirkungen aus dem Gebirge werden aus den geomechanischen Simulationen, die mit dem ausgewählten Parametersatz „mittel“ durchgeführt werden, abgeleitet.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine

<b>Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer:</b> DMT GmbH & Co. KG		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 12133B</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Weiterführung der Entwicklung von Ausbau von Grubenbauen für ein HAW-Endlager in Tongestein, Teilprojekt B		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte; Endlagertechnik und (geo-)technische Barrieren; C2.1 Sicherheits- und Endlagerkonzepte		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.07.2023 bis 31.08.2025	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2023 bis 31.12.2023	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 268.842,23 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Andreas Hucke	

### 1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

### 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

AP 1: Vertiefende Planung der Tübbingsschale nach EC2

AP 2: Entwicklung und Dimensionierung der Streckenkreuze

AP 3: Gesamtsystembetrachtung und Systemanalyse

AP 3.1: Gesamtsystembetrachtung

AP 3.2: Systemanalyse

AP 4: Dokumentation und Visualisierung

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Erster Arbeitsschwerpunkt war die Zusammenstellung eines geeigneten Parametersatzes zur Beschreibung der Eigenschaften des Tongesteines. Zu der Datensammlung aus dem Vorhaben AGENT wurden weitere bzw. neuere Literaturquellen recherchiert und zugefügt. Darauf aufbauend wurden drei unterschiedliche Parametersätze für "günstige", "durchschnittliche" und "ungünstige" Gebirgseigenschaften erarbeitet und definiert. Die Parametersätze enthalten (anisotrope) elastische Gesteinseigenschaften (E-Modul und Querdehnzahl) und definieren ebenso Festigkeitseigenschaften der Matrix und der Schichtung im Gebirgsverbund (jeweils Kohäsion, Reibungswinkel, Zugfestigkeit, Dilatanzwinkel und entsprechende Restwerte im Nachbruchbereich).

Für die Untersuchungen der Hauptstrecken inklusive Streckenkreuze ist die Modellierung mit der Software FLAC3D vorgesehen. Im ersten Schritt ist es dazu erforderlich, ein Stoffgesetz auszuwählen, mit welchem das geomechanische Verhalten des Gebirges realitätsnah abgebildet werden kann. Die Herausforderung dabei ist, dass die aktuell implementierten Stoffgesetze nicht alle Parameter der gewählten Parametersätze in vollem Umfang berücksichtigen können. So ist mit dem SUBI-Stoffgesetz die Nachbildung der anisotropen Festigkeitsparameter (Kohäsion, Reibungswinkel, etc.), inklusive deren Entfestigung möglich. Jedoch kann die Anisotropie der elastischen Parameter nicht modelliert werden. Dies ist mit dem UBI-Stoffgesetz möglich, allerdings kann hierbei keine Reduktion der Festigkeitsparameter, d.h. keine auflockerungsbedingte Entfestigung nachgebildet werden. Im Rahmen des Projektes wurde deshalb begonnen, mittels eines vereinfachten Modells eine Erweiterung der existierenden Stoffgesetze im FLAC3D durch Implementierung zusätzlicher Funktionen vorzunehmen.

Parallel finden Arbeiten zur Modellierung von Tübbingausbau statt. Es hat sich gezeigt, dass eine realitätsnahe Nachbildung des Tübbingausbaus mit FLAC3D systembedingt nur eingeschränkt möglich ist. Speziell das Verhalten der Fugen zwischen den Tübbingsegmenten hat einen signifikanten Einfluss auf die Stabilität des Ausbaus und muss deshalb bei der Modellierung mitberücksichtigt werden. Aus diesem Grund ist es hier sinnvoll, die Tübbingsäule anstatt mit FLAC3D mittels der Software 3DEC zu modellieren. Dadurch ist es möglich, die expliziten Trennflächen (z.B. Fugen zwischen den Tübbingsegmenten) realitätsnah nachzubilden. Im Rahmen des Projektes ist es geplant, gekoppelte Modelle zur realitätsnahen Modellierung von Gebirge und Ausbauverhalten zu erstellen. Die Belastungen aus dem Gebirge auf die Ausbauschaale werden mittels eines FLAC3D-Modells ermittelt. Diese Belastungen werden anschließend auf den im 3DEC-Modell erstellten Tübbingausbau transferiert und die Tübbingschaale daraufhin dimensioniert. Erste erfolgsversprechende Testberechnungen wurden bereits durchgeführt.

Zur Nachbildung eines realistischen Verhaltens des Tübbingausbaus sind Inputparameter wie z.B. Form / Geometrie der Tübbingsegmente, die Art der Verbindung, die Festigkeit des Tübbings unter Berücksichtigung der Fugen sowie eine mögliche Bewehrung, erforderlich. Hierzu wurden bereits erste Kontakte zu Baufirmen, die Tübbinge einsetzen bzw. herstellen aufgenommen, um dort realitätsnahe Parametersätze für die Modellierung zu erhalten.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Die Untersuchungen zur Erarbeitung eines Stoffgesetzes zur realitätsnahen Nachbildung des gebirgsmechanischen Verhaltens des Tongesteins mittels des vereinfachten FLAC3D-Modells werden abgeschlossen. Das ermittelte Stoffgesetz inklusive der dazugehörigen Parameter wird auf das großräumigere FLAC3D Modell transferiert und die Auffahrsequenz einer Hauptstrecke wird nachgebildet. Nach Fertigstellung der Strecke werden Zusatzbelastungen auf das Modell aufgegeben, welche Kriech- und Quellprozesse im Tongestein berücksichtigen. Die Lasten auf die Ausbauschaale werden ausgelesen und auf das 3DEC-Modell übertragen und eine Auslegung der Tübbingschaale wird erfolgen.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine

<b>Auftragnehmer:</b> Friedrich-Schiller-Universität Jena (FSU)		<b>Förderkennzeichen:</b> 02 E 12153A	
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Erosion von Bentonit unter In-situ Bedingungen durch Einwirkung natürlicher Wässer in geologischen Tiefenlagern (EVIDENT), Teilprojekt A			
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> C1.1 Geowissenschaftliche und geotechnische Methoden zur Standorterkundung (Feld und Labor), C1.2 Charakterisierung des Geosystems und Geosynthese, C1.3 Thermisch, hydraulische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb) Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung, C2.3 Geotechnische und technische Barrieren und C3.3 Werkzeuge der Sicherheitsanalyse			
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.06.2023 bis 30.05.2026		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2023 bis 31.12.2023	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 395.520,00 EUR		<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Schäfer	

## 1. Vorhabenziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

Die Arbeiten sind in das CFM-Projekt am Grimsel Felslabor eingebettet und bauen zum Teil auf den in Kolorado-e<sup>3</sup> (FKZ: 02 E 11759A) erzielten Erkenntnissen auf, betrachten aber auch gänzlich neue Aspekte.

## 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

AP1: Experimentelle Arbeiten

AP2: Modellrechnungen

AP3: Projektkoordination und Qualitätsmanagement

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Die Doktorandenstelle konnte im Berichtszeitraum zum 01.12.2023 besetzt werden.

Das CFM Annual-Partner Meeting fand am 4. und 5. Juli in Daejeon (Korea) statt und die in EVIDENT involvierten Partner GRS, KIT-INE und FSU konnten ihre geplanten Arbeiten direkt vor Ort vorstellen. Diese geplanten Arbeiten werden in den Arbeitspaketen der CFM Phase 5 Eingang finden und in dem noch abzustimmenden Programm implementiert werden.

Weiterhin wurden Teile der bisherigen Daten im Rahmen eines Vortrags der „Topical Session“ des CRC-6 Plenary Meetings in Daejeon (Korea) vom 13.-15. Juni 2023 online präsentiert.

Ein spezieller Fokus wird die Untersuchung in einem neuen Dipol in direktem Kontakt mit einer Lamprophyr-Struktur sein (u.a. Bohrung CFM23.001). Diese Bohrung und die Strukturen im Untertagelabor Grimsel (GTS) wurden im Rahmen des Masterprogramms Geowissenschaften (MGEO001 Interdisziplinäres Arbeiten und MGEO002 Geowissenschaftliches Geländeseminar) mit 17 Masterstudierenden geophysikalisch, geologisch und mineralogisch ausgewertet und die Daten werden für einen Bericht zusammengefasst, siehe auch GTS (2023).

Das EVIDENT Kick-off Meeting fand am 27.11.2023 in Berlin im Hybridformat mit den Projektpartnern sowie Vertretenden von Nagra, Fracture-Systems, BGE und dem Projektträger statt. Weitere bilaterale Abstimmungen erfolgten und erfolgen momentan.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Bilaterale Treffen mit Projektpartner aus dem KIT-INE zur Koordinierung von Zusammenarbeit an Experimenten und Planung von Experimenten.

AP1: Experimentelle Arbeiten sind geplant ab Januar zu starten. Diese beinhalten das Aufbereiten des MX-80, des wärmebehandelten und von SKB zur Verfügung gestellten MX-80 und FEBEX Proben sowie anschließende Erosionsexperimenten. Dabei sollen der behandelten MX-80 Tonmineralfraktion gezielt Quarzsand größerer Korngröße (40-60µm) zugesetzt werden, um den Einfluss der Größenverteilung nicht reaktiver akzessorischer Gemengeanteile auf die Erosion zu überprüfen. Anschließend sollen die gleichen Experimente mit den wärmebehandelten Bentoniten durchgeführt werden, um den Einfluss des Wärmepulses auf das Erosionsverhalten des Bentonits zu untersuchen.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

GTS (2023): Grimsel Test Site (GTS) Newsletter, Year 5, Vol. 09; <https://www.grimsel.com/media-and-downloads/gts-newsletters>, page 9.

<b>Auftragnehmer:</b> Karlsruher Institut für Technologie (KIT)		<b>Förderkennzeichen:</b> 02 E 12153B	
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Erosion von Bentonit unter In-situ Bedingungen durch Einwirkung natürlicher Wässer in geologischen Tiefenlagern. Kurztitel: EVIDENT			
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> C1.1 Geowissenschaftliche und geotechnische Methoden zur Standorterkundung (Feld und Labor), C1.2 Charakterisierung des Geosystems und Geosynthese, C1.3 Thermisch, hydraulische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb) Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung, C2.3 Geotechnische und technische Barrieren und C3.3 Werkzeuge der Sicherheitsanalyse			
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.06.2023 bis 30.05.2026		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2023 bis 31.12.2023	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 395.520,00 EUR		<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Geckeis	

## 1. Vorhabenziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

Die Arbeiten sind in das CFM-Projekt am Grimsel Felslabor eingebettet und bauen zum Teil auf den in Kolorado-e<sup>3</sup> (FKZ: 02 E 11759A) erzielten Erkenntnissen auf, betrachten aber auch gänzlich neue Aspekte.

## 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

AP1: Experimentelle Arbeiten

AP2: Modellrechnungen

AP3: Projektkoordination und Qualitätsmanagement

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Aus dem im früheren Kolorado-e<sup>3</sup> Projekt betriebenen Mock-up Test wurde eine weitere Probe entnommen und mittels (SF) ICP-MS analysiert. Das untersuchte Bentonitprobenstück hatte Kontakt mit der Öffnung einer Radionuklidtracerrampulle und reichte bis zum inneren Rand des Bentonitrings. Die Konzentrationen der aus der Ampulle herausdiffundierten Radionuklide <sup>233</sup>U und <sup>237</sup>Np lagen im selben Bereich wie die in Stücken aus früheren Probennahmen gefundenen und lagen meist unter 25 ng/g. Weiterhin wurde der aus dem Grimsselfelslabor (GTS) ins INE transportierte Bentonitzylinder, der aus dem LIT Experiment stammt, einem  $\mu$ -CT-Scan unterzogen. Dieser lieferte ein dreidimensionales Bild der 16 Tracerrampullen und ihrer Positionen und der Verteilung von Mikrorissen im Bentonit. Anschließend erfolgte die Probeentnahme eines an eine Tracerrampulle angrenzenden Bentonitstücks, das vom Kontaktbereich des LIT Zylinders und der Granodiorit-Scherzone stammte. Auch in dieser Probe wurden wie bei den Mock-up Test Proben Diffusionsprofile bestimmt. Auf diese Weise wurde das erste Diffusionsprofil von <sup>237</sup>Np aus dem In-situ Experiment erhalten. Die Verteilung des <sup>237</sup>Np in der Probe entsprach dem in den Mock-up-Tests gemessenen (Konzentration <sup>237</sup>Np  $\leq$  30 ng/g).

Vom 18. Januar bis zum 2. Mai wurde am GTS ein neuer In-situ Radionuklid Tracer Test (CFM Run 22-02) unter advektiven Bedingungen durchgeführt. Die Verweilzeit der Tracer-Tonkolloidsuspension in der Kluft lag zwischen denen des CRR Run 32 und des CFM Run 13-05. Die Analyse der Radionuklid-Tracer (<sup>22</sup>Na, <sup>63</sup>Ni, <sup>137</sup>Cs, <sup>232</sup>Th, <sup>233</sup>U, <sup>237</sup>Np, <sup>242</sup>Pu und <sup>243</sup>Am), sowie der Bentonitkolloide im aus der granitischen Kluft austretenden Eluat erfolgte im Kontrollbereich des KIT-INE. Als Analysemethoden kommen Gamma Spektrometrie, LSC und (SF) ICP-MS zum Einsatz. Die bisher erhaltenen Ergebnisse zeigen Durchbruchkurven der einzelnen Radionuklide, wobei die Tracerwiedererhalte zwischen denen der Experimente CRR Run 32 und CFM Run 13-05 liegen. Interessanterweise weisen die Messdaten auf eine abrupte Reduktion des <sup>237</sup>Np vom fünfwertigen zum vierwertigen Oxidationszustand während der Migration in der Kluft hin.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Die Probennahmen und –analysen aus Mock-up Test und LIT werden fortgesetzt. Ein Fokus liegt auf der Interpretation der Ausbreitungsprofile der Radionuklid-Tracer im Bentonit. Die Analyse der Proben aus dem CFM Run 22-02 wird ebenfalls weitergeführt, um weitere Informationen über die geochemische Speziation der Radionuklid-Tracer in der Granodiorit-Migrationszone sowie die Dynamik des kolloidgetragenen Radionuklidtransports zu liefern. Die im Projektantrag beantragte Post-Doc Stelle wurde ausgeschrieben und die Bewerbungen befinden sich derzeit in der Auswertung.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

LIT and mock up post mortem analysis. Kouhail, Y.; Quinto, F.; Blechschmidt, I.; Geckeis, H.; Geyer, F.; Lanyon, B.; Metz, V.; Noseck, U.; Roth, T.; Schneeberger, R.; Schäfer, T. 2023, July 4. **Vortrag** am CFM Phase 4 – Project Meeting (2023), Daejeon, South Korea, July 4–5, 2023

New CFM radionuclide tracer test dedicated to kinetic processes under in situ conditions at the Grimsel test site. Quinto, F.; Blechschmidt, I.; Geckeis, H.; Kontar, K.; Lanyon, B.; Marquardt, C. M.; Noseck, U.; Plaschke, M.; Schneeberger, R.; Schäfer, T. 2023, July 4. **Vortrag** am CFM Phase 4 - Project Meeting (2023), Daejeon, South Korea, July 4–5, 2023

CFM Phase 5: Objectives and way forward - KIT INE. Quinto, F.; Geckeis, H. 2023, July 5. **Vortrag** am CFM Phase 4 - Project Meeting (2023), Daejeon, South Korea, July 4–5, 2023

New radionuclide tracer test dedicated to kinetic processes under in-situ conditions at the Grimsel Test Site. Quinto, F.; Blechschmidt, I.; Bouby, M.; Chen, Z.; Geckeis, H.; Lanyon, B.; Marquardt, C. M.; Noseck, U.; Plaschke, M.; Schneeberger, R.; Schäfer, T. 2023, September 29. **Vortrag** am 18th International Conference on the Chemistry and Migration Behavior of Actinides and Fission Products in the Geosphere (Migration 2023), Nantes, France, September 24–29, 2023

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> 02 E 12153C	
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Erosion von Bentonit unter In-situ Bedingungen durch Einwirkung natürlicher Wässer in geologischen Tiefenlagern (EVIDENT), Teilprojekt C			
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> C1.1 Geowissenschaftliche und geotechnische Methoden zur Standorterkundung (Feld und Labor), C1.2 Charakterisierung des Geosystems und Geosynthese, C1.3 Thermisch, hydraulische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb) Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung, C2.3 Geotechnische und technische Barrieren und C3.3 Werkzeuge der Sicherheitsanalyse			
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.06.2023 bis 31.05.2026		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2023 bis 31.12.2023	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 291.110,00 EUR		<b>Projektleiter:</b> Dr. Holger Seher	

## 1. Vorhabenziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

Die Arbeiten sind in das CFM-Projekt am Grimsel Felslabor eingebettet und bauen zum Teil auf den in Kolorado-e<sup>3</sup> (FKZ: 02 E 11759C) erzielten Erkenntnissen auf, betrachten aber auch gänzlich neue Aspekte.

## 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

AP1: Experimentelle Arbeiten

AP2: Modellrechnungen

AP3: Projektkoordination und Qualitätsmanagement

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP2: Entwicklung eines ersten generischen Modells zur Berücksichtigung von Ungewissheiten im Rahmen von probabilistischen Rechnungen. Durchführung erster Testrechnungen mit einer reduzierten Anzahl variiertes Parameter mit dem Rechencode COFRAME gekoppelt an das Statistikmodul RepoStar.

Durchführung weiterer Parametervariationsexperimente zum besseren Verständnis der Effekte, die die Radionuklid-Konzentrationsprofile in den Mock-Up Experimenten bestimmen.

AP3: Teilnahme am CFM Project Meeting in Daejeon, Südkorea zum Abschluss der CFM Phase 4 und Planung der Arbeiten in Phase 5.

Ausrichtung und Teilnahme am EVIDENT Kick-Off Meeting in Berlin bei der GRS zur Planung der Arbeiten und Kooperationen mit allen EVIDENT Partnern.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

AP2: Vorbereitung eines 2. Benchmarks zum Kationenaustausch im Bentonit, insbesondere zum Einfluss der sich im Experiment verändernden Dichte, zur Auflösung von Ca-Phasen wie Calcit oder Gips und zum Kationenaustausch mit Radionukliden.

Erweiterung des Rechenmoduls COFRAME zur Berücksichtigung von unterschiedlichen Sorptionsplätzen von Schadstoffen auf Kolloiden, die sich in der Desorptionskinetik unterscheiden. Angedacht ist ein double-site bzw. multi-site Modell, welches bereits für die Modellierungen von anderen Gruppen für in-situ Experimente verwendet wurde.

Testen und Weiterführung der probabilistischen Rechnungen mit COFRAME. Vergrößerung der Anzahl der zu variierten Parameter.

Sofern neue experimentelle Daten zur Radionuklidverteilung im überbohrten Kern des LIT-Experiments vorliegen, Diskussion mit den Projektpartnern Anpassung der Modellrechnungen an die neuen Erkenntnisse.

AP3: Teilnahme am Online-Meeting zur Planung der neuen Feldexperimente in CFM-Phase 5

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine

<b>Auftragnehmer:</b> Karlsruher Institut für Technologie (KIT) - Kompetenzzentrum für Materialfeuchte, 76128 Karlsruhe		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 12163A</b>
<b>Vorhabenbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Vertikales hydraulisches Dichtsystem nach dem Sandwich-Prinzip – Hauptprojekt Phase 2 (Sandwich-HP2), Teilprojekt A		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> C2.3: Geotechnische und technische Barrieren, C2.4: Monitoring, C3.1: Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-) Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.07.2023 bis 30.06.2027	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2023 bis 31.12.2023	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 870.108,53 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Katja Emmerich	

## 8. Vorhabenziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

## 9. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

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

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

AP2 (KIT, TUBAF): Begleitendes Laborprogramm

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

AP3 (GRS, KIT, TUBAF): Interpretative Modellierung

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

AP4 (KIT, GRS): Projektkoordination und Dokumentation

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

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

**AP1:** Siehe Projektstatusbericht der GRS zu 02E12163B.

**AP2:** Die Quelldruckserie 2 mit Calcigel (Trockenrohichten 1.4 -1.75 g/cm<sup>3</sup>, 200 °C) und Pearson water A3 wurde wiederholt. Der quelldruckverstärkende Einfluss von Pearson water A3 wurde bestätigt. Die MiniSandwich Versuche 13 und 14 (Serie 7) laufen seit >1000 d. Der Quelldruck ist konstant bei 1,2 MPa bzw. 0,6 MPa. Das austretende Fluid wird kontinuierlich beprobt und analysiert. Der HTV-9 wurde mit 10 bar Fluiddruck fortgesetzt. Der Volumenstrom beträgt momentan ca. 5-6 ml/h und die Gesamtmenge an eingetretenem Fluid beträgt 180 l. Der Porendruck in ES1 ist konstant bei etwa 5.7 bar. Der Quelldruck in DS2 ist inzwischen höher als im DS1. Das Fluid erreichte nach 220 d im August das ES2 zwischen Secursol MHP1 (70/30) im DS2 und Calcigel im DS3. Im Anschluss kam es zu einem deutlichen Quelldruckanstieg in DS3 und abgeschwächt in DS4.

**AP3:** Die Berechnung des Anteils der Zwischenschichtporosität an der Gesamtporosität für verschiedenen Trockendichten in Calcigel und Secursol MHP1 (70/30) zur Verbesserung des Double-Structure Models wurde begonnen. Weitere Arbeiten siehe Halbjahresbericht von GRS und TUBAF zu 02E12163B bzw. 02E12163C.

**AP4:** Das Kick-Off Meeting zum Projekt fand am 26./27.09.23 in Braunschweig statt.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

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

AP2: Rückbau HTV-9 und Start der mineralogischen Analysen, Vorbereitung HTV-10 sowie Quelldruckversuche und MiniSandwich Versuche mit Secursol MHP1 (70/30)

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

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Emmerich, K. et al., Shaft sealing with the sandwich sealing system - a large scale experiment at the Mont Terri rock laboratory, Euroclay 7/23 Bari, Italy.

Emmerich, K. et al., SANDWICH-HP: An in-situ experiment on the Sandwich sealing system for shafts in the Mont Terri rock laboratory, Projektstatusgespräch 2023 zu BMUV-geförderten FuE-Projekten zur Entsorgung radioaktiver Abfälle 11/23 Karlsruhe.

Siehe auch Projektstatusbericht der GRS zu 02E12163B

<b>Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 12163B</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Vertikales hydraulisches Dichtsystem nach dem Sandwich-Prinzip – Hauptprojekt Phase 2 (Sandwich-HP2), Teilprojekt B		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> C2.3: Geotechnische und technische Barrieren, C2.4: Monitoring, C3.1: Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-) Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.07.2023 bis 30.06.2027	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2023 bis 31.12.2023	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 314.250,80 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr.-Ing. Matthias Hinze	

## 1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

## 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

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

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

### AP2 (KIT, TUBAF): Begleitendes Laborprogramm

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

### AP3 (GRS, KIT, TUBAF): Interpretative Modellierung

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

### AP4 (KIT, GRS): Projektkoordination und Dokumentation

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

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

**AP1:** Die Aufsättigung des Dichtsystems in Schacht 1 wurde fortgesetzt. Durch Wechsel des Druckminderers zur Regelung des Gasdrucks wurde die Einstellbarkeit eines konstanten Lösungsdrucks für die Aufsättigung verbessert. Der Injektionsdruck beträgt zurzeit ca. 20 bar absolut, die Injektionsrate etwa 17 ml/h. Die Sensordaten lassen auf eine nahezu vollständige Aufsättigung des unteren Dichtsegments schließen. Die radialen Spannungen in dem Segment liegen zwischen 2,2 MPa und 2,6 MPa. Die übrigen Dichtsegmente zeigen eine geringe allmähliche Spannungserhöhung und Erhöhung der relativen Feuchte, die auf eine langsame Aufsättigung über das Gebirge zurückzuführen ist. Für Schacht 2 wurde Ende September eine Bewässerungsleitung für das obere Äquipotentialsegment nachgerüstet. Seit Mitte Oktober wurde der Druck für die Aufsättigung über die Druckkammer im Schachtgrund schrittweise erhöht. Dabei traten mehrere Leckagen an Leitungsverbindungen auf, die schnell behoben werden konnten. Der Injektionsdruck liegt zurzeit bei etwa 7,5 bar absolut, die Injektionsrate bei etwa 17 ml/h. Die Sensordaten zeigen die fortschreitende Aufsättigung des unteren Dichtsegments über die Lösung aus der Druckkammer sowie eine langsamere Aufsättigung der überliegenden Dichtsegmente durch das Gebirge.

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

**AP3:** Die bestehenden HM-Simulationen wurden gesichtet und mit der Einarbeitung in ein verbessertes Double-Structure-Materialmodell begonnen.

**AP4:** Das Kick-Off Meeting zum Projekt fand am 26./27.09.23 in Braunschweig statt. Zudem gab es zwei Online-Besprechungen (22.08. und 05.12.23) zur Fortsetzung des In-situ-Experiments. Für Berichte und Veröffentlichungen siehe Abschnitt 5.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

**AP1:** Weiterführung von Aufsättigung und Monitoring der Verschlussysteme in den beiden Experimentalschächten. Inbetriebnahme des hydraulischen Hochdruckkreislauf zur Aufsättigung in Schacht 2.

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

**AP3:** Fortsetzung der Modellkalibrierung und der hydraulisch-mechanischen Simulationen mit dem verbesserten Double-Structure-Materialmodell.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

García-Siñeriz, J.L. et al.: SW-A Experiment: As-built document of Shaft 2. Technical Note TN2022-62, Mont Terri Project, August 2023.

García-Siñeriz, J.L. et al.: SW-A Experiment: As-built of Sandwich FO Extensometer installation. Technical Note TN2022-20, Mont Terri Project, July 2023.

Hinze, M. et al.: Hydration and response of an experimental Sandwich shaft-sealing system at the Mont Terri rock laboratory, Safety of Nuclear Waste Disposal, 2, 175–176, <https://doi.org/10.5194/sand-2-175-2023>, 2023.

Wieczorek, K. et al.: SW-A Experiment: Sandwich-HP: Vertical Hydraulic Sandwich Sealing System – Second Sensor Data Report, Technical Note TN2023-69, Mont Terri Project, August 2023.

<b>Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer:</b> Institut für Geotechnik, TU Bergakademie Freiberg, Gustav-Zeuner-Str. 1, 09599 Freiberg		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 12163C</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Vertikales hydraulisches Dichtsystem nach dem Sandwich-Prinzip – Hauptprojekt Phase 2 (Sandwich-HP2), Teilprojekt C		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> C2.3: Geotechnische und technische Barrieren, C2.4: Monitoring, C3.1: Thermische, hydraulische, mechanische, chemische und (mikro-)biologische (THMCb-) Phänomene und Prozesse sowie deren Modellierung		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.07.2023 bis 30.06.2027	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2023 bis 31.12.2023	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 456.512,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Thomas Nagel	

## 1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

## 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

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

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

### **AP2 (KIT, TUBAF): Begleitendes Laborprogramm**

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

### **AP3 (GRS, KIT, TUBAF): Interpretative Modellierung**

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

### **AP4 (KIT, GRS): Projektkoordination und Dokumentation**

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

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

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

**AP2:** An der TUBAF wurde im Berichtszeitraum der 9. Halbtechnische Versuch (HTV9) als Vergleichsversuch zum Versuch im Schacht 2 in einer 80 cm Durchmesser großen Stahlzelle weitergeführt. Der HTV9 enthält 4 Dichtsegmente (DS; zwei Secursol MHP1 und zwei Calcigel) unterbrochen von Äquipotenzialsegmenten (ES) aus Feinsand. Während der Beaufschlagung mit Pearson water mit bis zu 1 MPa wurde die Druckentwicklung in den Segmenten weiter beobachtet und die TDR-Messwerte für die Auswertung zur Feuchteentwicklung in den Segmenten an die ISU mbH übermittelt. Hinzu kamen chemische Analysen der Wasserproben. Der Volumenstrom in die Druckzelle ist im Berichtszeitraum stetig abgefallen. In Konsistenz mit dieser Beobachtung lässt sich das Quellen des Secursol MHP1 in DS2 an den radialen und axialen Drücken ablesen. Seit September 2023 zeigen die Messungen einen Quelldruckaufbau in DS3 (Calcigel), der in radialer Richtung bisher langsamer voranschreitet als in DS2. In den Sandsegmenten ES2 und ES3 konnte bisher kein Porendruck aufgebaut werden. **AP3:** Aktuell erfolgt die Einarbeitung des eingestellten Personals in die relevanten Modellformulierungen (Double Structure Ansätze; HM und H<sup>2</sup>M Prozessmodelle in OpenGeoSys).

**AP4:** Das Kick-Off Meeting zum Projekt fand am 26./27.09.23 in Braunschweig statt. Zudem gab es zwei Online-Besprechungen (22.08. und 05.12.23) zur Fortsetzung des In-situ-Experiments. Für Berichte und Veröffentlichungen siehe Abschnitt 5.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

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

**AP2:** Die Festlegung des Versuchsregimes für die HTV erfolgt in ständiger Absprache mit dem KIT. Vor einer erneuten Fluidrunderhöhung wird abgewartet, wie sich die Drücke im Sandwich entwickeln. Außerdem fließen auch die Ergebnisse der TDR-Messungen in die Entscheidung ein. Des Weiteren sollen technische Erweiterungen des Versuchsstandes geprüft werden.

**AP3:** Modellerstellung für Labor- und in-situ Versuche, Auswahl unterschiedlicher Materialmodelle, Definition geeigneter Benchmarks für Doppelstrukturansätze.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Hinze, M. et al.: Hydration and response of an experimental Sandwich shaft-sealing system at the Mont Terri rock laboratory, Safety of Nuclear Waste Disposal, 2, 175–176, <https://doi.org/10.5194/sand-2-175-2023>, 2023.

<b>Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer:</b> Technische Universität Bergakademie Freiberg, Akademiestr. 6, 09599 Freiberg		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 12173</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Entwicklung eines salzgrusbasierten Versatzkonzepts unter der Option Rückholbarkeit - Phase 2 (SAVER II)		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> C2: Sicherheits- und Endlagerkonzepte; Endlagertechnik und (geo-)technische Barrieren C2.3 Geotechnische und technische Barrieren		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.11.2023 bis 31.10.2025	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.11.2023 bis 31.12.2023	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 473.567,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr.-Ing. Mischo	

### 1. Vorhabensziele / Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

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

### 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

<b>AP1</b>	<b>Untertägiges Messprogramm</b>
AP1.1	Fortsetzung des kontinuierlichen Monitorings der untertägigen Versatzkörper hinsichtlich Setzung, Druck, Feuchtigkeit, elektr. Leitfähigkeit, Permeabilität, Bewitterung
AP1.2	Regelmäßige Auslesung, Auswertung und Analyse der untertägig generierten Datensätze
<b>AP2</b>	<b>Laborprogramm</b>
AP2.1	Auswertung der in SAVER I entnommenen Proben beim Einbau, um Aussagen über das In-Situ-Verhalten beim Einbau von GESAV-, KOMPASS -und qualifiziertem trockenem Salzgrusmaterial mit Fuller-Verteilung treffen zu können
AP2.2	Regelmäßige In-Situ-Probenentnahme aus den Versatzkörpern für mechanische und geochemische Laboruntersuchungen

AP2.3	Untersuchung von möglichen Wechselwirkungen aufeinanderfolgender Versatzmaterialien im Großmaßstab möglich durch zonaren Aufbau der Versatzkörper
AP2.4	Bereitstellung einer Datenbasis für Salzforschungscommunity

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

**AP1:** Das Monitoring der beiden Versatzkörper im Steinsalzbergwerk der GSES GmbH in Sondershausen wird weitergeführt. Die Messinstrumente laufen ohne technische Defekte. Die Setzung im KOMPASS-Versatzkörper ist soweit fortgeschritten, dass die maximale Setzungsmessdistanz der Firstsonde erreicht wurde. Es hat sich bereits vorher gezeigt, dass die Setzung abnimmt, daher ist davon auszugehen, dass die Setzung nicht in großem Maße weiter voranschreitet. (AP 1.1 + AP 1.2)

**AP2:** Die gewonnenen Proben wurden bereits hinsichtlich ihrer Dichte durch die TU Freiberg ausgewertet. Dadurch ergeben sich Kenntnisse über die jeweiligen Dichten je genutztem Material (GESAV, KOMPASS, QSV) sowie Versatzmethode. Die höchste Dichte wurde beim qualifizierten Salzgrus erreicht, der im Nahbereich um die POLLUX-Dummies verschleudert wurde. Dies ist vermutlich eher bedingt durch die Korngrößenverteilung des Materials als durch die genutzte Versatzmethode (Schleuderversatz) (AP2.1). Die Probennahme wurde bis Dezember 2023 in 4-wöchigen Intervallen weitergeführt und ab Januar 2024 in Absprache mit dem Institut für anorganische Chemie der TU Freiberg in 8-wöchigen Intervallen. Die Auswertungen haben gezeigt, dass ab September 2023 die Bildung des Polyhalits im GESAV-Versatzkörper abgeschlossen ist. Mechanische Untersuchungen wurden an Laborprüfkörpern durchgeführt, welche bei verschiedenen Temperaturen hergestellt wurden, um Erkenntnisse über temperaturabhängiges Materialverhalten zu erlangen. (AP2.2) Wechselwirkungen zwischen den verschiedenen Bereichen (GESAV-QSV; KOMPASS-QSV) konnten mit der verbauten Messtechnik nicht festgestellt werden. Es zeigten sich keine Feuchtigkeitsmigrationen von einem Bereich in den anderen, lediglich ein Feuchtigkeitsensor verzeichnete eine konstante Zunahme. (AP2.3) Aktuelle ausgewertete Daten werden mit der GRS geteilt.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

**AP1:** Gegen Projektende ist geplant eine Distanzmessung von Firste zu Versatzkörper durchzuführen. Zudem soll nochmals evaluiert werden, ob ein 3D-Laserscan bessere Ergebnisse liefern kann, da bereits in der Vergangenheit die Versuchsorte via LIDAR vermessen wurden. Der Weiterbetrieb und das kontinuierliche Auslesen und Auswerten der untertägig generierten Daten wird entsprechend Projektplan weitergeführt. Da die Polyhalitbildung nachweislich abgeschlossen ist, werden die Orte in 8-wöchigen statt 4-wöchigen Intervallen befahren. Monitoring und Auswertung wird entsprechend Projektplan weitergeführt. (AP1.1+1.2)

**AP2:** Momentan wird das genaue Laborprogramm mit den jeweiligen Partnern (IfG, GRS) koordiniert und soll demnächst gestartet werden. (AP2.1) Die TU Freiberg wird ab Anfang März weitere Proben im Labor herstellen für einaxiale Druckversuche. (AP2.2) Im Labor wird zudem über einen Aussaigerversuch ermittelt, ob der Feuchtigkeitsausschlag der gewählten Sensoren unter Tage bedingt ist durch einen technischen Fehler oder durch gravitativ bedingte Feuchtigkeitsmigration. Des Weiteren werden Kompaktionsversuche durchgeführt, um ausschließen zu können, dass die Feuchtigkeitsmessung des Sensors signifikant beeinflusst wird durch Materialkompaktion an den metallischen Messspitzen. (AP2.3) Die vollständige Bereitstellung einer Datenübersicht ist zum Projektende geplant, jedoch werden bereits jetzt aktuelle Forschungsdaten mit Institutionen wie der GRS geteilt. (AP2.4)

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

DECOVALEX Symposium in Troyes, Frankreich (Poster-Session)

## **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> Bereich D2 Sozio-technische Fragestellungen		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2019 bis 30.09.2024	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2023 bis 31.12.2023	
<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):** Das jährliche TRANSENS Arbeitstreffen wurde vom 20.-22.09. in Kassel in Zusammenarbeit mit dem Fachgebiet Arbeits- und Organisationspsychologie der Universität Kassel organisiert und durchgeführt. In diversen Formaten wurden aktuelle Forschungsthemen und Fragen der Zusammenarbeit diskutiert. Die Sprecher:innen und Mitglieder der I-TD trafen sich am 6.10. zu einer Klausur in Kassel. Neben vielen Teilprojekten von TRANSENS wurde auch das Gesamtprojekt im Rahmen des zweitägigen, öffentlichkeitswirksamen Events „UniverCity – Uni in der Stadt“ der LU Hannover am 01.-02.12. im Marktplatzformat und in Gesprächen mit der interessierten Öffentlichkeit vorgestellt. Während des Forums Endlagersuche in Halle (17.-18.11.) wurde die Arbeit von TRANSENS durch Beiträge mehrerer Teilprojekte bekannt gemacht. Beim Projektstatusgespräch des BMUV in Karlsruhe (06.11.) wurde TRANSENS vorgestellt. Insgesamt wurden zwei weitere TRANSENS-Berichte (Nr. 10 & 11) zur Veröffentlichung begleitet. Es wurden 9 Newsletter versendet, die ein Publikum von bis zu 228 Leser:innen erreichten. Zum Austausch zwischen den Teams und der Koordination wurde eine Gesprächsreihe „TRANSENS auf der Zielgeraden“ gestartet. Die Vorbereitung der TRANSENS-Abschlussveranstaltung wurde weiterhin koordiniert. Aufgaben wie das Betreuen der TRANSENS-Hotline, der Meetings der I-TD, das Pflegen der Homepage und Artefaktdatenbank und die Koordinationsprechstunde wurden kontinuierlich fortgeführt.

**ELS & GEMS: Gemeinsame Arbeiten im TAP SAFE:** Das Thema „Indikatoren“ wurde weitergeführt. Teamübergreifend wurde an einem transdisziplinären Format zum Safety Case bei dem Forum Endlagersuche (17.-18.11.) mitgewirkt. Ein Wissensmarktstand zu Indikatoren wurde im Rahmen der Veranstaltung "UniverCity – Uni in der Stadt" in Hannover (01.-02.12.) präsentiert.

**ELS (TAP SAFE, EDU):** Im Rahmen der Konferenz „safeND23“ am 13.-15.09. in Berlin wurde ein transdisziplinärer Workshop durchgeführt, der sich mit ausgewählten Aspekten des Safety Case beschäftigte. Ein weiterer transdisziplinärer Workshop mit vier Kleingruppen fand am 18.11. auf der Veranstaltung „Forum Endlagersuche“ in Halle statt. Beide Workshops behandelten unter anderem das Thema "Indikatoren". Mit der Vorbereitung des SAFE-Abschlussworkshops, geplant für Mai 2024, wurde begonnen. ELS beteiligte sich an Konzeption, Organisation und Durchführung der TRANSENS-Sommerschule in Bad Honnef (13.-20.08.) und lieferte einen Beitrag zur TRANSENS-Ringvorlesung am 19.12. Die Selbstevaluation des TAP SAFE wurde im TRANSENS-Bericht Nr. 10 dokumentiert. Meilenstein 15 wurde erreicht.

**GEMS:** Die Entwicklung von multiphysikalischen Simulationen im Tongestein wurde fortgeführt. Diese Simulationen dienen dem Diskurs mit der AGBe in den TAPs TRUST und SAFE hinsichtlich der TH2M-Simulation von Zustandsgrößen sowie der Bewertung eines 2-Sohlen-Endlagers. Die Ergebnisdokumentation für den Abschlussbericht (TRUST M18 / SAFE M19) wurde vorangetrieben. TAP SAFE-spezifisch wurden die numerischen Simulationen am reduzierten Lokalmodell im Tongestein fortgeführt. Diese und vorherige

Simulationsergebnisse stehen als Input für td-Formate in Modul 3 zur Verfügung (SAFE M17 / M18). Darüber hinaus wurde der transdisziplinäre AGBe-Workshop vom 02.-03.06.2023 (SAFE Modul 5) ausgewertet und dokumentiert. TAP TRUST-spezifisch erfolgte die Auswertung und Dokumentation des 3. AGBe-Workshops zum Thema Monitoring sowie eine Synthese aller Ergebnisse des soziotechnischen Diskurses zu Monitoringanforderungen mit der AGBe (TRUST M16).

**risicare:** Arbeitsschwerpunkte lagen bei den td-Reviews mit Vortrag und td-Format an der safeND23 und bei der Fertigstellung des TRANSENS-Berichts 11 „Transdisziplinäre Reviews - Ein Ansatz zur Optimierung des Safety Case“; des Weiteren bei der Beteiligung an der Vorbereitung, Durchführung und Auswertung von Workshops auf der safeND23 und dem 2. Forum Endlagersuche. Ein td-Format und Berichtes zum Beitrag der Raumplanung untertage zur Sicherheit eines Endlagers wurden vorbereitet. Zusätzlich wurden Aktivitäten zur Vorbereitung der Abschlussveranstaltung und zum "Abschied von 2031" durchgeführt und im Sprecherteam mitgearbeitet.

#### 4. Geplante Weiterarbeiten

**ELS (Koordination und Kommunikation):** Die geplanten Veranstaltungen (insbesondere das Arbeitstreffen Berlin vom 28.02.-01.03.) werden organisiert und die Durchführung begleitet. Ein Jour Fixe mit dem Beirat TD wird in diesem Rahmen abgehalten. Mit Blick auf die weitere Projektlaufzeit stehen einige TRANSENS-Berichte sowie Arbeiten zur Vorbereitung des Projektabschlusses an.

**ELS (TAP SAFE, EDU):** Für das kommende Halbjahr sind die Einreichung dreier Artikel, darunter ein Beitrag zum als Sammelband erscheinenden TRANSENS-Bericht der Bearbeiter:innen, sowie die Vorstellung eines Posters (Tage der Standortauswahl 2024) geplant. An der Konferenz „Waste Management 2024“ in Phoenix (USA) wird über das TAP SAFE berichtet. Die Ergebnisse der Wissensmarktstände werden in einen TRANSENS-Bericht einfließen, der sich gegenwärtig in Vorbereitung befindet.

**GEMS:** Zukünftig sollen numerische Simulationen im Tongestein mit dem 1- und 2-Sohlen-Lokalmodell durchgeführt werden (TAP SAFE TZ-2). Darüber hinaus wird weiterhin an der Ergebnisdokumentation im Hinblick auf den Abschlussbericht gearbeitet (TRUST M18 / SAFE M19). Des Weiteren wird an einem Beitrag im Rahmen des als Sammelband erscheinenden TRANSENS-Berichts der Bearbeiter:innen gearbeitet.

**risicare:** Das Thema „Beitrag der Raumplanung untertage zur Sicherheit eines Endlagers“ wird fortgeführt. Workshops mit der AGBe sind in Planung. Die Mitarbeit im Sprecherteam wird fortgeführt.

#### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Eckhardt, A. et al. (2023): Entscheidungen in die weite Zukunft- Ungewissheiten bei der Entsorgung hochradioaktiver Abfälle, Springer VS, Wiesbaden 2023

Eckhardt, A. et al. (2023): Optimising the safety case through transdisciplinary research?, in: Bundesamt für die Sicherheit der nuklearen Entsorgung (Hg.), Volume 2, 2023 | Interdisciplinary Research Symposium on the Safety of Nuclear Disposal Practices safeND 2023 2023, DOI: <https://doi.org/10.5194/sand-2-187-2023>, <https://sand.copernicus.org/articles/2/187/2023/>

Eckhardt, A./ Krütli, P./ Röhlig, K.-J. (2023): Extended peer reviews for resilient safety, in: Bundesamt für die Sicherheit der nuklearen Entsorgung (Hg.), Volume 2, 2023 | Interdisciplinary Research Symposium on the Safety of Nuclear Disposal Practices safeND 2023, Vol. 2, Online 2023, S. 83-84, DOI: <https://doi.org/10.5194/sand-2-83-2023>, <https://sand.copernicus.org/articles/2/83/2023/>

Eckhardt, A./ Krütli, P./ Röhlig, K.-J. (2023): Transdisziplinäre Reviews - Ein Ansatz zur Optimierung des Safety Case 2023, DOI: 10.21268/20231106

- Othmer, J.A./ Lux, K.-H./ Wolters, R./ Feierabend, J.: Transdisciplinary research with respect to trust/confidence building by longer-term, near-field monitoring of a geological repository – part II, *Saf. Nucl. Waste Disposal*, 2, 253–253, <https://doi.org/10.5194/sand-2-253-2023>, 2023.
- Smeddinck, U./ Eckhardt, A./ Kuppler, S. (2023): Toward a repository for high-level radioactive waste: Perspectives and approaches, Oekom Verlag 2023, S. 11-17, <https://www.tatup.de/index.php/tatup/article/view/7007/11774>
- TRANSENS-SAFE (2023): *Optimierung des Safety Case durch transdisziplinäre Forschung* 2023, DOI: 10.21268/20230605-3

<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:</b> Bereich D2 Sozio-technische Fragestellungen		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2019 bis 30.09.2024	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2023 bis 31.12.2023	
<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; Einbindung der DBG in die Vorbereitung und Durchführung von Workshop F
- Weiterentwicklung der VR-Anwendung zur Visualisierung von endlagerrelevanten Zeiträumen
- Teilnahme an regelmäßigen TD-Treffen mit anderen TAPs.
- Mitorganisation eines Workshops auf der safeND-Konferenz in Berlin (13.-15.09.2023) in Zusammenarbeit mit TAP-TRUST.
- Durchführung des Workshops E-3 in Heilbronn/Neckarwestheim (22.-23.09.2023)
- Mitorganisation und Durchführung von Workshop F in Hannover (03.-04.11.2023)
- Betreuung eines Stands (VR-Anwendung) bei der Veranstaltung Innovercity in Hannover (01.-02.12.2023)
- Verfassung von zwei Beiträgen für den Sammelband zur Standortvereinbarung.
- Verfassung eines Beitrags für den Sammelband der TRANSENS-BearbeiterInnen zur Transdisziplinarität.
- Vorstellung von Projektergebnissen:
  - Sierra, R., Die Entsorgung hochradioaktiver Abfälle als komplexes soziotechnisches Problem. Gastvortrag Universidad del Norte, Barranquilla (Kolumbien), 28.07.2023.
  - Sierra, R. „Intergenerational Justice: Trade-offs in interim storage“. Im Rahmen des Workshops Intra- vs. inter-generational justice trade-offs in nuclear waste storage. SafeND 2023, Berlin 15.09.2023.
  - Sierra, R. „Endlagerung, Zwischenlagerung und intergenerationale Gerechtigkeit“. Im Rahmen der Vortragsreihe vom ISL-E *Ressourcenschonende Energien und klimaneutrale Stadtentwicklung*. Wismar, 20.10.2023.
  - Vorträge von Christian Loos mit TRANSENS-Bezug:
    - 19.10.2023
    - *Acceptability criteria for the ethical evaluation of transformation paths of energy supply systems. Challenges and recommendations for action in social work* (Vortrag im Rahmen der Lecture Series: *Social-Ecological Transformation - International & Interdisciplinary Perspectives*. Ort: Hochschule Hannover [online]).
    - 13.11.2023
    - *Zur handlungswissenschaftlichen Relevanz prozeduraler und kooperativer Gerechtigkeit*. Vortrag im Rahmen der Ringvorlesung: *Soziale Gerechtigkeit im Kontext Sozialer Arbeit* (Ringvorlesung analog zu M 4.5 „Einführung in die Ethik“). Ort: Hochschule Hannover [in Präsenz]).

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Weiterentwicklung der VR Anwendung
- Auswertung Ergebnisse der Workshop-Reihe E
- Auswertung Ergebnisse des Workshops F

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

R. Seidl, C. Drögemüller, R. Sierra: Intra- vs. intergenerational justice tradeoffs in nuclear waste storage, <https://doi.org/10.5194/sand-2-27-2023> (Abstract)

Bräuer, P., Berg, M., Mazarakis, A., Peters, I. (2023) Movement in Virtual Time – How Virtual Reality Can Support Long-Term Thinking. In **Mensch und Computer 2023 (MuC '23)**, **September 03--06, 2023, Rapperswil, Switzerland**. ACM, New York, NY, USA 5 Pages. <https://doi.org/10.1145/3603555.3608569>

<b>Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer:</b> Freie Universität Berlin, FB Politik und Sozialwissenschaften		<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> Bereich D2 Sozio-technische Fragestellungen		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2019 bis 30.09.2024	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2023 bis 31.12.2023	
<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

- 4 Vorträge beim Gesamttreffen von TRANSENS in Kassel etc.
- 1 Veröffentlichung im Fachjournal, 1 in Tageszeitung
- Ausarbeitung und Präsentation eines Thesenpapiers zur Öffentlichkeitsbeteiligung für die 77. Sitzung des Nationalen Begleitemiums (NBG) am 12.09.2023
- Fertigstellung und Einreichung der Dissertation von Lucas Schwarz: „Die Landkarte der Gerechtigkeit. Eine integrative Perspektive auf die nukleare Entsorgung in Deutschland“
- Einreichung einer Kurzfassung „Auswertung des Workshops im Museum für Naturkunde in Berlin“ bei tdAcademy (Langfassung unten: Brunnengräber et al in FJSB 3/2023)
- Einreichung und Überarbeitung im Peer-Review-Verfahren des Artikels „Exclusive Public“ (Political Frontiers, Albert Denk)

- Einreichung und Überarbeitung zweier Fachbeiträge im Rahmen eines TRANSENS Arbeitsbericht aus dem TAP DIPRO (Achim Brunnengräber und Albert Denk)

#### DIPRO:

- Vorbereitung für den DIPRO-Workshop F und Teilnahme am 3./4.11.2023 in Garbsen
- Theoretisch-konzeptionelle Vorbereitung der teilnehmenden Beobachtung beim zweiten Forum Endlagersuche (6.-14.11: Forumstage (digital); 17./18.11 Forum in Halle (in Präsenz und digital))
- Online-Teilnahme an Forumstagen und am Forum Endlagersuche; Auswertung und Beginn mit Verschriftlichung für einen Forschungsartikels
- Beginn der Arbeiten zum Thema Kernprobleme auf dem Entsorgungspfad

#### BegleitTeam.TD:

- Unterstützende Vorbereitung einer interaktiven Sitzung zur transdisziplinären Forschung beim Gesamttreffen in Kassel
- Regelmäßige Teilnahme an monatlichen Online-Treffen

#### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Begutachtung der Dissertation von Lucas Schwarz
- Fortsetzung der Arbeit an der Dissertation von Dörte Themann
- Weitere Analysen zum KENFO und Betreuung der MA-Arbeit von Jan Sieveking: „KENFO as a Case of State Asset Financialisation in Germany“, Weitere Arbeiten zu den Kernproblemen auf dem Entsorgungspfad

#### 5. Berichte, Veröffentlichungen, Vorträge

##### VORTRÄGE:

- Themann, Dörte; Schwarz, Lucas und Denk, Albert: „Endlagerstandortauswahl als partizipative Herausforderung“ (12.09.2023), auf der 77. Sitzung des Nationalen Begleitgremiums.
- Brunnengräber, Achim: tdF in der DIPRO-Kritik; Universität Hannover (03.11.)
- Denk, Albert: Forschungsergebnisse TRANSENS der FU Berlin; Universität Hannover (03.11.)
- Denk, Albert: Präsentation DIPRO Workshop F beim td-Interessierten Online-Treffen (11.12.)

##### VERÖFFENTLICHUNGEN:

- Brunnengräber, Achim; Denk, Albert; Schwarz, Lucas; Themann, Dörte (2023): (Nicht) Mein Endlager. Explorative Forschung zum gesellschaftlichen Umgang mit hochradioaktiven Abfällen – ein partizipativer und transdisziplinärer Ansatz. In: Forschungsjournal Soziale Bewegungen Plus. 36 (3), online: [Brunnengräber, Denk, Schwarz, Themann: \(Nicht\) Mein Endlager - FJSB \(forschungsjournal.de\)](https://www.forschungsjournal.de/brunnengraeber-denk-schwarz-themann-nicht-mein-endlager)
- Brunnengräber, Achim (2023): Rendite auf Kosten von Nachhaltigkeit. Der Staatsfonds KENFO soll die Entsorgung von Atommüll in Deutschland finanzieren. Aber wie transparent arbeitet er?, in Berliner Zeitung Nr. 161 vom 14. Juli 2023, online auch hier: <https://www.berliner-zeitung.de/open-source/oeffentlich-rechtliche-stiftung-macht-verlust-verfehlt-der-kenfo-seine-ziele-li.365871>

<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> Bereich D2 Sozio-technische Fragestellungen		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2019 bis 30.09.2024	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2023 bis 31.12.2023	
<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 Tiefenlagernsystemen unter Berücksichtigung der technischen Barrieren und deren Implikationen durchgeführt, wobei insbesondere die Verknüpfung von Infrastruktur-, Strahlenschutz- und Betriebssicherheitsaspekten verschiedener Komponenten des Entsorgungspfades analysiert werden.

Zusammenarbeit im Forschungsverbund TRANSENS: Das Arbeitspaket 2 „Technische und verfahrenstechnische Komponenten von Entsorgungspfaden und deren Nebenfolgen“ wird durch einen Mitarbeiter des KIT-INE geleitet. Gemeinsam mit dem Öko-Institut unterstützt ein Mitarbeiter des KIT-INE die Leitung des TAP „HAFF“ durch das KIT-ITAS. Außerdem sind Mitarbeiter des KIT-INE am TAP-übergreifenden Projekt zum Sammelband zu „Ungewissheiten“ beteiligt.

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Die Schwerpunkte der Arbeiten des KIT-INE (F. Becker und V. Metz) liegen im Modul „Pfadabhängigkeit als Risiko und Herausforderung“ des TAP „Handlungsfähigkeit und Flexibilität in einem reversiblen Verfahren“ (HAFF). Im zweiten Halbjahr 2023 arbeiteten F. Becker und V. Metz im Rahmen des von D. Scheer (KIT-ITAS) initiierten TAP HAFF Querschnittsprojekts „Zukunftspfade Endlager“ zur Pfadidentifikation, Folgenanalyse und einer vergleichenden Pfadheuristic von potentiellen Entsorgungspfaden. Im Kontext der Verknüpfung von Zwischenlagerung mit der Entwicklung eines Tiefenlagersystems analysieren F. Becker und V. Metz zusammen mit T. Hassel (Leibniz Universität Hannover) und J. Neles (Öko-Institut) einen der potentiellen Entsorgungspfaden. Hierzu ist ein Manuskript mit dem Arbeitstitel „Betrachtungen zur Option der direkten Endlagerung von in Deutschland vorhandenen Transport- und Zwischenlagerbehältern der CASTOR-Familie in tiefen geologischen Formationen“ in Vorbereitung. F. Becker arbeitete mit A. Eckhardt, V. Mintzloff, D. Scheer und R. Seidl im Herausgeberteam des TAP-übergreifenden Sammelbands „Ungewissheiten“. KIT-INE ist an folgenden Kapiteln des Sammelband beteiligt: (a) Die Einleitung des Sammelbandes „Die Vielfalt der Ungewissheit bei der Entsorgung hochradioaktiver Abfälle“ von R. Seidl, F. Becker, A. Eckhardt, V. Mintzloff und D. Scheer; (b) der abschließenden Beitrag „Das Unbekannte vorausdenken?“ von A. Eckhardt, F. Becker, V. Mintzloff, D. Scheer und R. Seidl; (c) das Kapitel „Ungewissheiten und Narrative im Kontext der Entsorgung hochradioaktiver Abfälle – eine schwierige Beziehung?“ von F. Becker und M. Berg; (d) „Trittsicherheit auf Zukunftspfaden? Ungewissheitsbewältigung bei der Entsorgung hochradioaktiver Abfälle“ von D. Scheer, F. Becker, T. Hassel, P. Hocke, T. Leusmann und V. Metz. Der Beitrag von F. Becker und M. Berg „Ungewissheiten und Narrative im Kontext der Entsorgung hochradioaktiver Abfälle – eine schwierige Beziehung?“ zum Sammelband wurde von F. Becker auszugsweise auf dem TRANSENS-Arbeitstreffen 20. bis 22. September in Kassel vorgestellt. F. Becker und V. Metz beteiligten sich regelmäßig an den Online- bzw. Präsenztreffen des TAP-HAFF; darüber hinaus beteiligte nahm F. Becker an den Online- bzw. Präsenztreffen der EL-Nano-Lesegruppe (KIT-ITAS), des Herausgeberteams zum o.g. Sammelband, der TD-Interessierten (ETH Zürich) und der TRANSENS-Bearbeiter\*innen teil. Mit einem eingeladenen Vortrag zu Interdependenzen von Zwischen- und Endlagerung beteiligte sich V. Metz an der safeND Tagung im September in Berlin

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Das Herausgeberteam des TAP-übergreifenden Sammelbands „Ungewissheiten“ hat Ende 2023 (nach dem Lektorat des Verlages Springer Nature) die Endversionen aller Beiträge nochmals gesichtet, so dass, so dass die Publikation voraussichtlich im ersten Halbjahr 2024 bei Springer Nature erscheinen wird. Das Manuskript von F. Becker, V. Metz, T. Hassel und J. Neles soll im ersten Halbjahr 2024 fertiggestellt und zur Veröffentlichung in „atw – International Journal for Nuclear Power“ eingereicht werden. Darüber ist eine Mitarbeit von F. Becker und V. Metz im TRANSENS-Bericht „Aspekte im Hinblick auf eine Neugenehmigung von HAA-Zwischenlagern nach 40 Jahren Betriebszeit“ von Neles et al. für 2024 vereinbart worden. Neben einigen Online- bzw. Präsenztreffen im Arbeitspaket TAP HAFF sind Beteiligungen mit Vortrag / Vorträgen / Posterpräsentationen am TRANSENS Arbeitstreffen Ende Februar 2024 in Berlin und am Abschlusstreffen in Hannover im September 2024 geplant.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Volker Metz, Interim storage - final disposal interdependences. International Symposium Interdisciplinary Research Symposium on the Safety of Nuclear Waste Disposal Practices (safeND), 15. September 2023, Berlin.

<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> Bereich D2 Sozio-technische Fragestellungen		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2019 bis 30.09.2024	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2023 bis 31.12.2023	
<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:

Bei Verfahren zu großtechnologischen Projekten wie der Endlagerung hochradioaktiver Abfälle zeichnen sich die Institutionalisierungsprozesse der Verstetigung professionellen Handelns sowohl durch stark formalisierte Prozesse als auch sozio-technische Praktiken aus, die im positiven Fall hochwertig ineinandergreifen und analytisch als Governance verstanden werden. „Handlungsfähigkeit“ und „Flexibilität“ sind dabei von besonderer Bedeutung und wurden im Berichtszeitraum in Workshops, Vorträgen und Veröffentlichungen mit dem Konzept „Lernendes Verfahren“ nach StandAG verknüpft. Dazu wurden u.a. zwei Workshops mit Praxisakteuren durchgeführt. Von ITAS wurde zusammen mit der DAEF Impulsvorträge auf diesen Workshops sowie auf dem „Forum Endlagersuche“ (Halle, Nov. 23) eingebracht. Die Herausforderungen eines „lernenden Verfahrens“ hängen in spezieller Weise mit Kontinuität und Flexibilität von Behörden und Verwaltungen zusammen; dazu wurde der Abschlussbericht „Verwaltungshandeln in einem bundesdeutschen reversiblen Verfahren“ veröffentlicht (Kirchhof / Koshelev 2023). Auf Grundlage dieser Arbeiten werden Vorschläge für die Sicherung und Handlungsfähigkeit im Verfahren der Standortauswahl vorbereitet.

Der ITAS-TRANSENS Design-Thinking-Workshop (Mai 2023) führte zu einem eingereichten Buchbeitrag für einen Sammelband mit dem Arbeitstitel „Hands on! Wie durch kollaboratives Erarbeiten von Lösungsideen neue Räume der Zusammenarbeit entstehen“, der die methodischen Stärken der gewählten Methodik reflektiert (Bechthold & Enderle 2024 i.E.). Drei weitere Vorträge aus dem TAP HAFF wurden bei der Konferenz SafeND 23 in Berlin gehalten und im Abstract-Band (Safety of Nuclear Waste Disposal) veröffentlicht (Enderle / Bechthold 2023, Hocke 2023j, Scheer 2023). Beim BGE-Fachworkshop „Sicherheitsgerichtete integrierte Managementsysteme“ wurde je ein Poster zu „Lernen als gemeinsamen Prozess gestalten“ und eines zu „Resiliente Endlagerung“ präsentiert.

#### TAP EDU:

Fortführung des ITAS-Textseminars zu einschlägiger Forschungsliteratur zu den Themen Transdisziplinarität und sozialwissenschaftlicher Endlagerforschung

#### TAP DIPRO:

Vom AP Recht wurde kontinuierlich an der Kommentierung zum StandAG gearbeitet. Weiterhin war das AP Recht Co-Veranstalter des DIPRO-Workshop F, der gemeinsam mit dem IW Hannover vorbereitet und durchgeführt wurde (in Kooperation mit FFU Berlin und CAU Kiel). Dem ITAS-AP Recht-Workshop zur Standortvereinbarung vom Juni 2023 folgt ein interdisziplinärer Sammelband, der redaktionell koordiniert wird und für den ein eigener Beitrag erarbeitet wurde. ITAS/AP Recht war beteiligt an Planung und Durchführung eines weiteren Workshops zum lernenden Verfahren in Kooperation mit der DAEF (12.9.2023). Gleiches gilt für eine Session anlässlich des Planungsforums Endlager (18.11.2023).

### 4. Geplante Weiterarbeiten

#### TAP HAFF:

- Auswertung der Ergebnisse aus den ITAS-Transsens Arbeitspaketen und der gemeinsamen TAP-Ergebnisse
- Pointierte Darstellung der robusten ITAS-TRANSENS-Ergebnisse
- Fortführen und Planung neuer Weiterbildungsaktivitäten zum Thema „Technikfolgenabschätzung und Governance im selbstlernenden Verfahren“ sowie zum Thema „selbstlernendes Verfahren als soziotechnische Herausforderung“
- Kommentierung Stand AG

#### TAP DIPRO:

AP Recht arbeitet primär weiter an der Kommentierung zum StandAG. Verschiedene Publikationen, insbesondere ausstehende TRANSENS-DIPRO-Berichte sind abzuschließen. Außerdem müssen in DIPRO die abschließenden Handlungsempfehlungen kondensiert und

formuliert werden. Dazu dient eine Zusammenschau robuster Zwischenergebnisse aus den DIPRO-Workshops.

## 5. Berichte, Veröffentlichungen

Bechthold, E. (2023): Lernen als gemeinsamen Prozess gestalten. BGE-Fachworkshop „Sicherheitsgerichtete Integrierte Managementsysteme – Wie werden Organisationen resilient und lernend?“. Wolfsburg, Deutschland, 09.11.2023 – 10.11.2023. DOI: 10.5445/IR/1000165538. <https://publikationen.bibliothek.kit.edu/1000165538>

Enderle, S.; Bechthold, E. (2023): Solving problems collectively in nuclear waste governance, *Saf. Nucl. Waste Disposal*, 2, 267- 267. <https://doi.org/10.5194/sand-2-213-2023>.

Hocke, P. (2023): Thinking in alternatives and reflecting possible futures in German nuclear waste management: insights from technology assessment, *Saf. Nucl. Waste Disposal*, 2, 213- 214. <https://doi.org/10.5194/sand-2-213-2023>.

Kirchhof, A. M.; Koshelev, Y. (2023): Verwaltungshandeln in einem bundesdeutschen reversiblen Verfahren für die aktuelle Suche nach einem Endlagerstandort für hochradioaktive Abfälle, Karlsruhe. ITAS-TRANSENS-Paper Nr. 5./ demnächst unter [https://www.itas.kit.edu/projekte\\_hock19\\_transens.php](https://www.itas.kit.edu/projekte_hock19_transens.php) zu freiem download

Kuppler, S. (2023): Resiliente Endlagerung. Eine begriffliche Annäherung. BGE-Fachworkshop „Sicherheitsgerichtete Integrierte Managementsysteme – Wie werden Organisationen resilient und lernend?“ (2023), Wolfsburg, Deutschland, 9.–10. November 2023

Scheer, D.; Becker, F.; Hassel, T.; Hocke, P.; Leusmann, T.; Metz, V. (2024): Trittsicherheit auf Zukunftspfaden? Ungewissheitsbewältigung bei der Entsorgung hochradioaktiver Abfälle, in: Eckhardt, E.; Becker, F.; Mintzlaff, V.; Scheer, D.; Seidel, R. (Hrsg.) (2024): Entscheidungen in die weite Zukunft, Springer Nature VS, Wiesbaden – in press.

Scheer, D. (2023): Nuclear disposal pathways under conditions of uncertainty, *Saf. Nucl. Waste Disposal*, 2, 215- 216. <https://doi.org/10.5194/sand-2-215-2023>.

**2 Smeddinck, U. (2023): Rezension von Étienne Davodeau, Das Recht der Erde - Eine Erzählung über den Boden, der uns trägt, Hamburg 2023, Technikfolgenabschätzung in Theorie und Praxis 2/2023, 62 – 63**

**3 Smeddinck, U.; Eckhardt, A.; Kuppler, S. (2023): Toward a repository for high-level radioactive waste: Perspectives and approaches. Zeitschrift für Technikfolgenabschätzung in Theorie und Praxis, 31 (3), 11–17. doi:10.14512/tatup.31.3.11**

## 6. Vorträge

Enderle, S.; Bechthold, E. (2023): Solving problems collectively in nuclear waste governance 2023. Interdisciplinary research symposium on the safety of nuclear disposal practices (safeND 2023), Berlin, Deutschland, 13.–15. September 2023

**4 Scheer, D. (2023): Sozio-technische Herausforderungen beim Umgang mit neuen Technologien, 2023. 4. Wasserstoffmotor Konferenz (WMK 2023), Karlsruhe, Deutschland, 12. September 2023**

Scheer, D. (2023): Nuclear disposal pathways under conditions of uncertainty, 2023. 2. Internationale Forschungssymposium für die Sicherheit der nuklearen Entsorgung (safeND 2023), Berlin, Deutschland, 15. September 2023

Scheer, D. (2023): Technikfolgenabschätzung als (Methoden-)integrative Wissenschaft zwischen Notwendigkeit und Herausforderung. Antrittsvorlesung im Rahmen der Habilitation (2023), Karlsruhe, Deutschland, 19. Juli 2023

Scheer, D.; Sardo, S.; Kuppler, S. (2023): No easy way out: towards a framework concept of Long-term Governance. *Energy, Environment and Societies in Crises: ESA RN12 mid-term*

and Energy and society Network. 6th Energy and Society Conference, Trient, Italien, 6.–7. September 2023

Smeddinck, U. (2023): Die Standortvereinbarung als ein Mechanismus der Gerechtigkeit bei der Ansiedelung eines Endlagers für Atommüll? Vortrag im Seminar „Energy Ethics“, Studiengang Europäische Kultur und Ideengeschichte bzw. Philosophie, Institut für Technikzukünfte, Karlsruher Institut für Technologie, 20. Juli 2023

Smeddinck, U. (2023): Stärkung der Demokratie durch die „Gegen-Demokratie“? Zu den Vorschlägen Pierre Rosanvillons, Vortrag anlässlich der 5. Tage der Demokratie, Triangel Karlsruhe, 13. September 2023

Smeddinck, U. (2023): Die Standortvereinbarung – ein vernetztes Forschungsthema für Trans-, Inter- und Disziplinarität, Vortrag anlässlich des TRANSENS-Arbeitstreffens, Universität Kassel, 20. September 2023

### **Sonstiges**

Smeddinck, U.; Hocke, P.; Bechthold, E. (2023): Workshop “AG 5: Das lernende Verfahren – eine Aufgabe für alle?”. Impulsvorträge und Moderation, 2. Forum Endlagersuche (2023), Halle, Deutschland, 17.11.2023 – 18.11.2023, DOI: 10.5445/IR/1000165540, <https://publikationen.bibliothek.kit.edu/1000165540>

<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> BMW-Forschungsförderung zur nuklearen Sicherheit Projektförderprogramm des Bundesministeriums für Wirtschaft und Energie zur Sicherheitsforschung für kerntechnische Anlagen 2021–2025 – Bereich D2 Sozio-technische Fragestellung		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2019 bis 30.09.2024		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2023 bis 31.12.2023
<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): Ein Paper zu den Ergebnissen der Surveys zur Rolle von Vertrauen im Endlagerkontext ist in der zweiten Reviewrunde. Ein weiteres wurde überarbeitet und neu eingereicht. Die Ergebnisse der AGBe-Workshops wurden in einem Bericht zusammengefasst. Gemeinsam mit AGBe-Mitgliedern ist eine Teilnahme am 2. *Forum Endlagersuche* und dem Event *UniverCity* erfolgt. Das Modul wurde hier jeweils vorgestellt. Zudem wurden zwei Workshops auf dem safeND-Symposium des BASE organisiert.

- TAP TRUST (Modul 2): Gemeinsam mit Bürger\*innen wurde eine Reihe öffentlicher Veranstaltungen (z.B. *Ist unsere Demokratie in Gefahr?*) rund um das Thema Radioaktivität durchgeführt. Des Weiteren wurden, neben den durchgeführten Gamma-Messungen, ein Bericht über die Messungen von Tritium und Kohlenstoff-14 in Umweltproben an der Asse veröffentlicht und die Ergebnisse der Zusammenarbeit vor Ort auf öffentlichen Veranstaltungen gemeinsam reflektiert.

- TAP SAFE (Modul 6): Das im vorherigen Halbjahr erstellte Webtool wurde auf der safeND als Posterpräsentation vorgestellt und deutlich erweitert. Erste Simulationen zum Langzeittransport von Radionukliden im Boden wurden durchgeführt und auf der *Migration-Konferenz* als Poster vorgestellt. Im Rahmen einer Masterarbeit wurden Batchversuche zur Selensorption an den RefeSols durchgeführt.

- EDU: Vom 13.08.-20.08. fand die 2. TRANSENS Sommerschule unter dem Titel *Going Beyond – Requirements for Long-Term Strategies* in Bad Honnef statt. An der Sommerschule nahmen insgesamt 61 Personen aus 21 Ländern teil, wobei BASE, BGE und BGZ in die planerische Ausgestaltung eingebunden und vor Ort vertreten waren. Die Ringvorlesung wurde einmal wöchentlich von abwechselnden Referenten aus dem Projekt gehalten.

IW: TAP HAFF: Basierend auf den IW-Arbeitszielen erfolgte in Zusammenarbeit mit KIT-INE, TUB-iBMB und ÖI die Fortführung der Arbeiten zu Entsorgungspfaden. Die Arbeit einer konkretisierten Beschreibung des Pfades der direkten Endlagerung von TLB (gemeinsam mit KIT-INE) wurde fortgeführt. Hierzu wurde die Endlagerfähigkeit des Castorbehälters CASTOR HAW28 anhand seiner Konstruktionsmerkmale betrachtet.

- TAP DIPRO: Im Rahmen der TD-Taskforce wurde mit der DIPRO-Begleitgruppe (DBG) gearbeitet. Mit Blick auf die Ergebniskonsolidierung wurde Workshop F gemeinsam mit KIT-ITAS und Uni Kiel vorbereitet. Zudem erfolgte eine inhaltlich motivierte Teilnahme an der Veranstaltung *Tage der Standortauswahl* mit dem Fokus auf dem Themengebiet Behältertechnik – angeregt durch Diskussionen mit den Mitgliedern der DBG.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

IRS: TAP TRUST (Modul 1): Der TRANSENS-Bericht zum Thema Transdisziplinarität ist in der zweiten Review-Runde. Drei weitere TRANSENS-Berichte sind fertiggestellt und gehen demnächst ins interne Review (2. Vertrauen-Survey, AGBe-Rekrutierung, TRUST-Workshops). Arbeiten an weiteren Fachveröffentlichungen laufen. Außerdem wird an der Erstellung eines Sammelbandes zum Thema Transdisziplinarität mitgewirkt, der als TRANSENS-Bericht erscheinen soll. 2024 sind zwei AGBe-Workshops mit dem TAP SAFE geplant.

- TAP TRUST (Modul 2): Die publizierten Ergebnisse sollen gemeinsam mit Bürger\*innen vor Ort diskutiert werden. In Zusammenarbeit mit dem *Strahlenschutz-Stammtisch Braunschweiger Land* werden weitere öffentliche Veranstaltungen unter Einbezug von Stakeholdern und Öffentlichkeit organisiert und moderiert. Messungen und Schulung in der Bürgermessstelle werden fortgesetzt, wobei ein weiteres Mal Kontakt zu allen weiterführenden Schulen in der Region gesucht wird, um interessierte Lehrkräfte für das Projekt zu gewinnen.

- TAP SAFE (Modul 6): Die Simulationen zum Radionuklidtransport im Boden sollen fortgesetzt und ausgeweitet werden. Nach Auswertung der Batchversuche sollen anschließend Säulenversuche durchgeführt werden.

- EDU: Die Ringvorlesung wird erneut für das kommende Semester organisiert. Darüber hinaus sollen die Ergebnisse aus den TRANSENS-Arbeitsbereichen verstärkt mit Bürger\*innen auch außerhalb des Projektverbundes diskutiert und reflektiert werden.

IW: TAP HAFF: Das Werkstoffsystem „CASTOR“-Behälter wird durchleuchtet, um die anschließende Übertragbarkeit der Aussagen auf die relevanten anderen TLB Systeme zu erarbeiten. Zudem wird eine Übersichtsarbeit zu diesem Thema in Form einer Publikation gemeinsam mit KIT-INE und dem ÖI erarbeitet.

- TAP DIPRO: Zur Vorbereitung und Durchführung des geplanten Workshops F erfolgt die weitere Zusammenarbeit mit der DBG. Im Workshop F soll die TAP-gesamte Ergebnisschau der Lessons Learned erfolgen, wobei die Arbeiten derzeit in der Planungsphase sind. Es erfolgen Absprachen zur Agenda des Workshops innerhalb des Kernteams, bei denen IW und ITAS in Hauptverantwortung mitarbeiten.

## 5. Berichte, Veröffentlichungen

- Seidl, R., & Drögemüller, C. (**submitted**). Procedural fairness and safety in the acceptance of nuclear waste disposal in Germany: an empirical study. *Journal of Risk Research*.

- Hassel, T. (2023). Modul Behältertechnik für die Lagerung von radioaktiven Abfällen, TRANSENS-Ringvorlesung.

<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> D2: Sozio-technische Fragestellungen D2.1 Long-Term Governance D2.2 Sicherheitskultur und Mechanismen der Fehlerkorrektur im selbst hinterfragenden System		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2019 bis 30.09.2024	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2023 bis 31.12.2023	
<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, an allen drei ist das Öko-Institut beteiligt, wobei Modul 2 vom Öko-Institut verantwortet wird, und beinhaltet u.a. folgende Arbeitsschritte:

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

### TAP SAFE: Stakeholder-Perspektiven und Transdisziplinarität

Das TAP 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

Neben dem Arbeitstreffen im September in Kassel fanden Treffen sowohl in Präsenz als auch virtuell für übergeordnete und organisatorische Aufgabenstellungen sowie in den TAPs statt.

TAP HAFF: Modul 1: Aus den Arbeiten zu den Zukunftspfaden wurden vier Teilprojekte zur vertieften Bearbeitung abgeleitet. Das Team vom Öko-Institut befasst sich mit der Neugenehmigung von Zwischenlagern nach 40 Jahren Betriebszeit.

Modul 2: Derzeit werden die Ergebnisse des Workshops "Wahrnehmungen von Oberflächenanlagen eines Endlagers" ausgewertet und ein TRANSENS-Bericht zu den Gesamtergebnissen des Modul 2 verfasst. Auf der Konferenz safeND 2023 im September wurden Zwischenergebnisse vorgestellt. Zudem ist die Publikation mit dem Titel „Governing Nuclear Waste in the Long-term: On the Role of Place“ im Journal Historical Social Research eingereicht und angenommen, Erscheinungsdatum Anfang 2024.

TAP SAFE: Fortsetzung der fachlichen Unterstützung der Diskussion um inter- und transdisziplinäre Formate; der TRANSENS Bericht „Der Safety Case in der Endlagerung als ein Beispiel für die Bedeutung von Sicherheitsmanagement und -kultur“ befindet sich derzeit im Review und wird voraussichtlich Anfang 2024 veröffentlicht.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

TAP HAFF: In Modul 1 werden die identifizierten Teilprojekte bearbeitet. Vorgesehen ist eine Veröffentlichung der Arbeitsergebnisse als TRANSENS Bericht. In Modul 2 wird der Fokus auf der Auswertung des Workshops und der Verknüpfung mit den bisherigen Interviewergebnissen und Regionen-Workshops liegen. Zudem wird zur Reflexion wesentlicher Erkenntnisse mindestens eine Fokusgruppe mit Praxisakteuren durchgeführt – geplant ist eine Fokusgruppe mit (dt.) Akteuren, die im Schweizer Sachplanverfahren geologische Tiefenlager beteiligt waren und ggf. eine weitere Fokusgruppe in einer der drei in Modul 2 untersuchten Regionen (Landkreis Heilbronn), die eine potenzielle Standortregion sein könnte. Zudem sind die Vorbereitung und Finalisierung von Publikationen vorgesehen. Über die abschließenden Ergebnisse wird ein TRANSENS Bericht erstellt.

TAP SAFE: Zum Abschluss der Arbeiten im TAP SAFE wird der o. g. Bericht veröffentlicht.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Mbah, M.; Kelly, R.; Bremer, S.; Muxlhanga, H. (2023): Perceptions of surface facilities of a potential disposal site and the role of place attachment. Vortrag safeND, Berlin. 14.09.2023.

Mbah, M.; Kuppler, S. (i. E.): Governing Nuclear Waste in the Long-Term: On the Role of Place. Historical Social Research.

Högselius, P.; Gutting, A.; Meyer, T.; Mbah, M. (i. E.): Geographies of Nuclear Energy. Historical Social Research. Mitarbeit in der ARL-Arbeitsgruppe durch Ryan Kelly: Endlagersuche für radioaktiven Abfall in Deutschland - Zur Rolle von Raumplanung und Raumentwicklung“ der Akademie für Raumentwicklung in der Leibniz-Gemeinschaft (ARL). Hier werden unter anderem auch Ergebnisse aus den TRANSENS-Arbeiten des Öko-Instituts eingebracht. Hier hat Ryan Kelly die Co-Leitung der AG „Sozioökonomische Potenzialanalysen (mit Fokus auf Beteiligung und regionalen Raumwirkungen)“ inne. <https://www.arl-net.de/de/blog/konstituierende-sitzung-des-ak-endlagersuche-f%C3%BCr-radioaktiven-abfall-deutschland-zur-rolle-von>

<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> D2: Sozio-technische Fragestellungen		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2019 bis 30.09.2024	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2023 bis 31.12.2023	
<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

- Fabian Präger, Alexander Wimmers und Prof. Dr. Christian von Hirschhausen nahmen vom 20.-22.09.2023 am TRANSENS-Treffen in Darmstadt teil. Herr von Hirschhausen stellte in Podiums-Format seine Thesen zum Themenfeld „Abschied von 2031“ zur Diskussion vor.
- Prof. Dr. Christian von Hirschhausen nahm am 17.-18.11.2023 am Forum Endlager in Halle teil. Dort beteiligte er sich als Diskutant der Buchvorstellung von Wolfgang Ehmkes „Das Wunder von Gorleben“.
- Der TD-Beauftragte Fabian Präger nahm vom 03.-04.11.2023 am Workshop F in Hannover teil. Unter anderem präsentierte er dort die Ergebnisse der Forschungsarbeiten des Teams sowie der Reflektion über die bisherige TD-Arbeit im Projekt TRANSENS.
- Fabian Präger beteiligt sich weiterhin bei der Organisation und Betreuung der DIPRO Begleitgruppe.
- Fabian Präger, Alexander Wimmers und Prof. Dr. Christian von Hirschhausen haben ein Kapitel für den DIPRO-Bericht „Einblicke - Ein Querschnitt durch die Forschung des transdisziplinären Arbeitspakets DIPRO“ verfasst. Unter dem Titel „Atomwende und transdisziplinäre Begleitprodukte“ wurde eine Ergebniszusammenführung der vorausgegangenen Forschungsarbeiten erarbeitet und in die TD-Forschung eingeordnet.
- Im Winter 2023 wurden zwei Teilzeitstellen (jeweils 40 Monatsstunden für wissenschaftliche Mitarbeiter\*innen besetzt. Alexander Buschner und Youssef Farag wurden zum 01.12.2023 eingestellt und unterstützen bei der Recherche zum Thema Finanzierung und Prinzipal-Agent-Thematiken sowie Erfassung von Daten über den weltweiten Bestand radioaktiver Materialien.
- Christian von Hirschhausen hat in Zusammenarbeit mit Alexander Wimmers das Papier mit dem Titel: „Rückbau von Kernkraftwerken und Entsorgung radioaktiver Abfälle in Deutschland: ordnungspolitischer Handlungsbedarf“ in der Zeitschrift „Perspektiven der Wirtschaftspolitik“ veröffentlicht, welches auf Forschungsarbeiten im Projekt TRANSENS beruht.
- Die Mitarbeiterin Kristin Dietrich unterstützt weiter bei wissenschaftlichen Arbeiten zu Themen der Finanzierung.
- Christian von Hirschhausen und Fabian Präger nahmen am internationalen Research Symposium „SafeND“ des BASE vom 12.-15.09.2023 teil.
- Fabian Präger und Christian von Hirschhausen nahmen weiterhin an regelmäßigen digitalen Austauschtreffen im Rahmen des DIPRO-Teilprojekts teil. Der Fokus lag dabei insbesondere auf der Ergebnissynthese (Vorbereitung Workshop F) sowie der Vorarbeiten für die Abschlussveranstaltung.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Geplante Weiterarbeiten werden am 22.01.2024 mit Herrn Jonas Müller in einer Gesprächsreihe "TRANSENS auf der Zielgeraden" erörtert und abgestimmt.
- Vorbereitungen Abschlussveranstaltung am 13. Und 14 September 2024 in Hannover. Hier wird das Team TUB in Fachvorträgen zentrale Ergebnisse der Forschungsarbeiten vorstellen und am zweiten Tag die im Projekt entwickelten transdisziplinären Begleitprodukten der interessierten Öffentlichkeit vorstellen, um ein niederschwelliges Angebot für Dialoge zur Endlagerthematik anbieten zu können.
- Wissenschaftliche Arbeiten zum Thema der Finanzierung werden weitergeführt und zu Ende gebracht.
- Weiterhin Austausch mit TAP HAFF zur Entsorgungspfade insbesondere über die Technologieoptionen und Pfadabhängigkeiten sowie Diskussion zur Atomwende.

- Vorbereitungen zum TRANSENS-Arbeitstreffen in Berlin vom 28.02. – 01.03.2024

## **5. Berichte, Veröffentlichungen**

Präger, Fabian, Alexander Wimmers und Christian von Hirschhausen. 2023. Atomwende und transdisziplinäre Begleitprodukte. In: Einblicke - Ein Querschnitt durch die Forschung des transdisziplinären Arbeitspakets DIPRO. Hg. Ulrich Smeddinck und Margarita Berg.

Von Hirschhausen, Christian, and Alexander Wimmers. 2023. "Rückbau von Kernkraftwerken Und Entsorgung Radioaktiver Abfälle in Deutschland: Ordnungspolitischer Handlungsbedarf." *Perspektiven Der Wirtschaftspolitik* 24 (3): 286–301.

<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> D2: Sozio-technische Fragestellungen		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2019 bis 30.09.2024	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2023 bis 31.12.2023	
<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 iBMB hat gemeinsam mit seinen Partnern von der FU Berlin und der TU Clausthal die unter ausgewählten Projektbeteiligten von TRANSENS durchgeführten Interviews zunächst transkribiert und in der zweiten Jahreshälfte intensiv ausgewertet. In diesen wurde ihr Beitragsempfinden in TRANSENS besprochen. Die erhobenen Daten und Ergebnisse wurden in Form eines Buchbeitrags für den geplanten TRANSENS Bearbeiterinnen und Bearbeiter Sammelband aufbereitet.

Vom 20.9.-22.09.2023 haben das iBMB und das IGG am TRANSENS Arbeitstreffen in Kassel teilgenommen. Das iBMB hat dabei mit den Projektpartnern des TAP HAFF, dem Öko-Institut und der Universität Kassel, 3D-Modelle von Oberflächenanlagen am Endlagerstandort im „Virtual-Lab“ präsentiert.

Anschließend hat das iBMB im TAP DIPRO gemeinsam mit den Projektpartnern von der Universität Kiel vom 22.9.-23.09.2023 den 3. 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 Heilbronn durchgeführt. Die Workshopreihe ist mit der Durchführung des 3. Workshops abgeschlossen. Die Ergebnisse aus den einzelnen Workshops an den unterschiedlichen Standorten in Form der Bürgerstatements werden aufbereitet, einander gegenübergestellt und ausgewertet.

Das IGG hat an der Finalisierung des Ungewissheiten-Sammelbands mitgewirkt, welcher im April 2024 veröffentlicht werden soll. Es hat an den Tagungen SafeND (13.-15.09.2023) und dem Forum Endlagersuche (17.-18.11.2023) teilgenommen. Im Rahmen von inovercity (einer Zwischennutzung eines ehemaligen Kaufhausgebäudes in Hannover) vom 01.-02.12.2023 wurden die Themen Zeitdimensionen und Rückholung mit Zeitleinen über 150 Jahre und eine Millionen Jahre und einem Spiel in verständlicher Form einem breiten Publikum nähergebracht. Weiterhin wurde das Modul und die Weiterbildung Tiefenlagerung auch dieses Jahr angeboten.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Das iBMB und das IGG werden am nächsten Projekttreffen vom 28.2. bis zum 1.3.2024 teilnehmen. Weiterhin wird das iBMB am Abschlussbericht im TAP HAFF mitarbeiten. Das iBMB beteiligt sich auf der Abschlusskonferenz am Wissenschaftstag, dem 13.09.2024, mit Postern zum adaptiven Lebensdauermanagement von Infrastrukturen und Gebäuden am Endlagerstandort und im Kontext der verlängerten Zwischenlagerung. Am zweiten Tag mit Öffentlichkeitsbeteiligung, dem 14.09.2024, beteiligt sich das iBMB am Marktstand zum visuellen Experiment zusammen mit dem Ökoinstitut und der Uni Kassel. Das IGG wird Stände zur Rückholung und zu den Zeitdimensionen, die bei der Betrachtung des Entsorgungsprozesses relevant sind, anbieten. Das IGG betreut weiterhin ein Bürgergutachten mit einem Teil der „Arbeitsgruppe Bevölkerung“ zu einer ausgewählten Fragestellung zum Thema Rückholung und Ungewissheiten. Dieses und die Ergebnisse der numerischen Berechnungen werden zusammengefasst und sollen anschließend publiziert werden.

Darüber hinaus werden Publikationen und studentische Arbeiten zu den Themen Lebensdauermanagement und Dauerhaftigkeit mit dem Schwerpunkt auf Schädigungs- und Alterungsmechanismen bei Stahlbetonbauwerken sowie Rückholung und Ungewissheiten betreut.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Tagungsbeitrag Seidl, R., & Mintzlaff, V. (2023). Communicating scientific uncertainties. Safety of Nuclear Waste Disposal. Berlin, 13.-15.09.2023

<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> D2: Sozio-technische Fragestellungen		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2019 bis 30.09.2024	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2023 bis 31.12.2023	
<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

Übergeordnet: Das TRANSENS-Arbeitstreffen fand vom 20.09. bis 22.09.23 in Kassel statt und wurde vom Fachgebiet ausgerichtet. Das Programm beinhaltete u.a. bisherige Projektzusammenfassungen, Vorplanungen zu Innovercity und das Forum Endlagersuche.

HAFF AP 1: Vorbereitung der TRANSENS Summer School (mit TAP EDU).

HAFF AP 2: TRANSENS Ringvorlesung (TAP EDU) zu den Auswirkungen der zeitlichen Verschiebung auf die Sicherheitskultur der zentralen Akteure.

HAFF AP 3: Vorbereitung und Durchführung des Projekttreffens in Darmstadt (mit Oeko Institut und TUC); Stand zum visuellen Experiment (mit Oeko Institut und TU Braunschweig) beim Wissensmarktplatz mit dem Thema „Indikatoren & Datenvisualisierung“.

HAFF AP 3: Auswertung der Aspekte der Kommunikationskultur aus dem Visuellen Experiment zu Fragestellungen zum Raumempfinden (mit Oeko Institut und TU Braunschweig).

SAFE AP 2: Weitere Ausarbeitung der Aspekte menschlicher Zuverlässigkeit anhand ausgewählter Anforderungen aus der Synopse zu den BMU Sicherheitsanforderungen und auf Basis der Ergebnisse der Tagung Technische Zuverlässigkeit (TTZ).

SAFE AP 3: Weitere Analyse der Methodik zur Bewertung des Einflusses menschlicher Zuverlässigkeit auf die zeitliche Verschiebung in der Endlagersuche im Rahmen der TRANSENS Ringvorlesung (TAP EDU).

SAFE AP 3: Verzögerte Veröffentlichung aufgrund Verzögerungen beim Verlag des Beitrags „Umgang mit Modellierungsungewissheiten“. Beitrag zum Sammelband ‚Ungewissheiten‘ des TRANSENS Projektes.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

HAFF AP 3: Veröffentlichung der Aspekte der Kommunikationskultur aus dem Visuellen Experiment zu Fragestellungen zum Raumempfinden (mit Oeko Institut und TU Braunschweig).

HAFF AP 3: Weiterentwicklung der transdisziplinären Methode mit Hilfe multimedialer Unterstützung durch den virtuellen Raum und Ausarbeitung und Anwendung entsprechender transdisziplinärer Szenarien, um die Wirksamkeit der transdisziplinären Ansätze zu erhöhen.

SAFE AP 2: Aspekte menschlicher Zuverlässigkeit anhand ausgewählter Anforderungen aus der Synopse zu den BMU Sicherheitsanforderungen werden für das kommende Projekttreffen zusammengestellt.

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 sowie der TTZ). Statt eines geplanten Beitrages zu einem TRANSENS-Sammelband ergab sich auf Anfrage die Möglichkeit, diese in einem Special Issue des renommierten Journals RESS (Reliability Engineering and System Safety) zu publizieren. Die Arbeitsergebnisse werden ferner auf der AHFE Konferenz 2024 dem Fachpublikum vorgestellt.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

- Sträter, O. (2023) Menschliche Zuverlässigkeit und Sicherheitskultur im Endlagerprozess. TRANSENS Ringvorlesung. Hannover.
- Othmer, A. & Muxlhanga, H., Lux, K.-H. & Sträter, O. (2024). Umgang mit Modellierungsungewissheiten. Beitrag zum Sammelband ‚Ungewissheiten‘ des TRANSENS Projektes.

<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 (SAFEGUARDS-3)		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Bereich D3: Kernmaterialüberwachung (Safeguards), Feld: 3.1		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.07.2019 bis 30.12.2024	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2023 bis 31.12.2023	
<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 undeckelter Nuklearmaterialien und Nuklearaktivitäten.

Das Vorhaben baut auf den Ergebnissen der vorangegangenen Vorhaben 02W6184, 02W6218, 02W6232, 02W6243, 02W6259 und 02W6263 auf. Die Arbeiten haben Bezug zum BMWi-Förderkonzept „Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle - (2015-2018)“, zu den strategischen Zielen des 7. Energieforschungsprogramm der Bundesregierung (2018) im Rahmen der Entsorgungs- und Endlagerforschung, zum Nationalen Entsorgungsprogramm (2015) sowie zum BMWi-IAEA Joint Programme. Die Arbeiten werden in enger Abstimmung zwischen Regierung, den Kontrollbehörden IAEO und Euratom, Industrie sowie Forschung und Entwicklung geplant und durchgeführt.

## 2. Untersuchungsprogramm / Arbeitspakete

- 6.1 Konzepte zur Kernmaterialüberwachung
  - AP 6.1.1 Safeguards-Konzepte für verlängerte Zwischenlagerzeiten
  - AP 6.1.2 Safeguards-Konzepte für unterschiedliche Endlagerkonzepte
  - AP 6.1.3 Safeguards-Konzepte für kerntechnische Anlagen im Rückbau
- 6.2 Methoden und Techniken zur Kernmaterialüberwachung
  - AP 6.2.1 Einschluss und Überwachung
  - AP 6.2.2 Erneute Behälterüberprüfung (Re-Verifikation)
  - AP 6.2.3 Methoden zur Entdeckung von unabhängigen Bergbauaktivitäten und Hohlräumen
  - AP 6.2.4 Geoinformationstechnologien
- 6.3 Kooperation, Kommunikation, Kapazitätsaufbau zur internationalen Kernmaterialüberw.
  - AP 6.3.1 Kooperation mit der Deutschen Gesellschaft für Auswärtige Politik (DGAP)
  - AP 6.3.2 Pflege des nationalen Safeguards-Internet-Portals
  - AP 6.3.3 Nationale Gremien
  - AP 6.3.4 Internationale Gremien

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP 6.1.1: Erarbeitung der konzeptionellen und technischen Anforderungen an die Safeguardsüberwachung der Zwischenlager in Deutschland bis mindestens 2050
- AP 6.1.2: Vorbereitung eines Promotionsprojekts zum Einsatz eines Digitalen Zwillings im Rahmen der Safeguardsüberwachung eines HAW-Endlagers
- AP 6.1.3: Beratung von Anlagenbetreibern zur Safeguardsüberwachung von Anlagen im Rückbau
- AP 6.2.1: Keine
- AP 6.2.2: Auswertung des Feldtests zur Eignung der Myonen-Tomographie zur Re-Verifikation von Brennelementbehältern in den Zwischenlagern
- AP 6.2.3: Durchführung eines Promotionsprojekts zur multitemporalen Satellitenbildanalyse im Rahmen der Safeguardsüberwachung von kerntechnischen Anlagen
- AP 6.2.4: Keine
- AP 6.3.1: Vorbereitung eines neuen Arbeitsprogramms für die AG2N
- AP 6.3.2: Keine
- AP 6.3.3: Mitarbeit in der Arbeitsgemeinschaft Kernmaterialüberwachung (AKÜ) sowie im Arbeitskreis Spaltstoffüberwachung des vgb energy e.V.
- AP 6.3.4: ESARDA: Leitung von zwei Arbeitsgruppen und Mitarbeit in weiteren Arbeitsgruppen; INMM: Leitung der 'International Safeguards Division'; INMM/ESARDA: Mitarbeit bei der Vorbereitung der zweiten gemeinsamen Jahrestagung, Wien, Mai 2023

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- AP 6.1.1: Fortsetzung der o.g. Arbeiten
- AP 6.1.2: Beginn des o.g. Promotionsprojekts
- AP 6.1.3: Fortsetzung der o.g. Arbeiten
- AP 6.2.1: Keine
- AP 6.2.2: Fortsetzung der o.g. Arbeiten
- AP 6.2.3: Fortsetzung der o.g. Arbeiten
- AP 6.2.4: Keine
- AP 6.3.1: Fortsetzung der o.g. Arbeiten
- AP 6.3.2: Keine
- AP 6.3.3: Fortsetzung der o.g. Arbeiten
- AP 6.3.4: Fortsetzung der o.g. Arbeiten; Mitarbeit bei der Vorbereitung der ESARDA Jahrestagung, Luxemburg, Mai 2024 und der INMM Jahrestagung, Portland, Juli 2024

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

A. Rezniczek (2023): Zusammenstellung von Informationen zur Beendigung der Sicherheitsüberwachung bei der Stilllegung und dem Rückbau von Reaktoranlagen. Bericht JOPAG/04.23-PRG-502

<b>Zuwendungsempfänger/Auftragnehmer:</b> RWTH Aachen		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 W 6281</b>	
<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> 01.07.2023 bis 31.12.2023	
<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 bereits in AP3 begonnenen Arbeiten zur Bestimmung der Signal- und Untergrundraten wurde fortgesetzt. Dazu wurden mehrere Studien durchgeführt: Basierend auf publizierten Arbeiten zu Szintillationsdetektoren (flüssig und Plastik) wurden die zu erwartenden Untergrundraten für den ober- und unterirdischen Einsatz eines Modelldetektors abgeschätzt. Dabei wurden sowohl absolute Untergrundraten als auch skalierbare Untergrundraten basierend auf der radioaktiven Materialreinheit berücksichtigt. Die Untergrundabschätzung wurde auf die Materialien für Flüssig-organische Zeitprojektionskammern (LOR-TPC) übertragen und mit Simulationen von kosmischen Myonen und assoziierten Aktivierungsprodukten kombiniert. Ein Nebenergebnis dieser Simulationsstudien ist die Wirksamkeit von Kunststoffen als Abschirmmaterial (PET, PEEK, POM-C) – zwischen 20-30 cm Material sind in der Lage 95+% aller externen Neutronen abzuschirmen. Aufgrund der momentanen Unsicherheiten des LOR-TPC Ansatzes bezüglich der Detektoreffizienz, Untergrundunterdrückung und der maximalen Größe des auslesbaren Volumens, wurde ein parametrisches Modell für die Untergrundraten entwickelt, das den Vergleich mit Szintillatorbasierten Ansätzen erlaubt.

Im Rahmen von AP4 und AP5 wurde der Einsatz im Rahmen von Re-Verifikationsaufgaben weiterentwickelt. Hierbei wurde die gezielte Überprüfung spezifischer Behälter im Zwischenlagerszenario betrachtet: Im Gegensatz zur generellen Überwachung, ist hier der Zustand spezifischer Behälter von Interesse, z. B. nach einer Auffälligkeit. Aufgrund der Strahlenbelastung ist auch eine partielle Reduktion der erforderlichen Inspektionen von Vorteil. Es wurden zwei Ansätze verfolgt: 1) angepasste Auswertemethoden für Re-Verifikationszenarien; 2) Nutzung der Richtungsauflösung der LOR-TPC-Technologie. Für die statistische Auswertung wurde der sequentielle Likelihood-Quotienten-Test (SLQT) zugrunde gelegt, da im Re-Verifikationsfall die Auffälligkeit als möglicher Entnahmezeitpunkt angenommen werden kann. Wird eine asymmetrischer Toleranz für Fehler I. und II. Art mit dem SLQT-Ansatz kombiniert, wird im Zwischenlager-Szenario der korrekte Inhalt eines Behälters im Mittel nach 6,5 Monaten verifiziert bzw. eine Abweichung im Mittel nach 5,4 Monaten detektiert. Wird eine konservative Winkelauflösung von 30 Grad bei der Rekonstruktion angenommen, so verkürzt sich im Schnitt die Verifikationszeit auf 3,1 Monate bzw. die Detektionszeit von Diskrepanzen auf 2,5 Monate. Diskussionen im Rahmen des Applied Antineutrino Workshops (AAP) 2023 ergaben ebenfalls, dass der Einsatz als Re-Verifikationsinstrument momentan als vielversprechendste Anwendung von Antineutrino-Detektoren im Kontext der Überwachung radioaktiver Abfälle gesehen wird.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Die Arbeiten an AP4 werden fortgesetzt: Eine Verbesserung der Rekonstruktion durch detaillierte Modellierung der Ereignissignaturen in den untersuchten Detektortechnologien sowie eine verbesserte Einbindung der AP3 Untergrundraten sind in Arbeit. Dazu werden verschiedene statistische Ansätze und Algorithmen aus dem Bereich der automatisierten Fehlererkennung eingesetzt um eine robuste Detektion von Diskrepanzen unter verschiedenen Bedingungen (u.a. variable Untergrundraten, Behälteranordnungen) zu ermöglichen. Diese weiterführenden Arbeiten werden auch in AP5 genutzt, um die untersuchten Szenarien zu konkretisieren, insbesondere um eine für die Re-Verifikation geeignete Konfiguration von Detektorgröße, -position und -laufzeit zu finden.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

#### Vorträge:

Y. Schnellbach, "Antineutrino detection concepts for safeguards monitoring of spent nuclear fuel". Vortrag am BASE safeND Symposium 2023 (12.09.2023).

Y. Schnellbach, "Nuclear Safeguards: Monitoring of Spent Nuclear Fuel". Vortrag am Applied Antineutrino Physics Workshop 2023 (18.09.2023).

Berichte & Studienarbeiten:

Maximilian Wrabetz, "Simulation of cosmogenic background in a LOr-TPC detector". Bachelorarbeit RWTH Aachen (08.08.2023).

Veröffentlichungen:

Y. Schnellbach *et al.*, "Antineutrino detection concepts for safeguards monitoring of spent nuclear fuel". Saf. Nucl. Waste Disposal, 2, 203–203, <https://doi.org/10.5194/sand-2-203-2023>, 2023.

## **Information zu Publikationen sowie zu Aus- und Weiterbildung**

In den Halbjahresberichten werden in kurzgefasster Form die Ergebnisse der aktuell bewilligten Forschungsvorhaben dargestellt. Vorhabenrelevante Publikationen werden aufgelistet, soweit es der Platz zulässt; es ist aber nicht immer möglich, alle im Rahmen eines FuE-Vorhabens erfolgten Veröffentlichungen (schriftlich oder mündlich) aufzunehmen. Ferner sind Informationen zur Aus- und Weiterbildung wissenschaftlichen Nachwuchses bei den Forschungseinrichtungen nicht explizit abgefragt und ausgewiesen worden.

Es wurde daher beginnend mit dem Jahr 2015 vereinbart, zukünftig Angaben zur Gesamtzahl der Publikationen und zu Ausbildungsaspekten zu machen. Die entsprechenden Daten werden von den Forschungseinrichtungen zur Verfügung gestellt.

Die zusammenfassende Darstellung erfolgt im jeweils zweiten Halbjahresbericht eines Kalenderjahres. Damit soll zusätzlich zur Kurzdarstellung der Vorhabenergebnisse in den Fortschrittsberichten dokumentiert werden, dass und wie die FuE-Ergebnisse verbreitet werden.

### **Publikationen**

Im Jahr 2023 erfolgten in rund 135 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 2023 rund 187 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 2023 waren in den hier aufgeführten FuE-Vorhaben 84 Nachwuchswissenschaftlerinnen und Nachwuchswissenschaftler in FuE-Vorhaben eingebunden.

### 3 Verzeichnis der Forschungsstellen

#### BGE TECHNOLOGY GmbH, Eschenstraße 55, 31224 Peine

- |                    |   |       |
|--------------------|---|-------|
| <b>02 E 11577A</b> | Verbundprojekt: Sicherheitsanalytische Untersuchungen zu Endlagersystemen im Kristallin (SUSE), Teilprojekt A   | 📖 20  |
| <b>02 E 11839</b>  | Entwicklung eines Leitfadens zur Auslegung und zum Nachweis von geotechnischen Barrieren für ein HAW Endlager in Salzformationen (RANGERS)  | 📖 34  |
| <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   | 📖 67  |
| <b>02 E 11900</b>  | Langzeitsicherheit von Verschlussystemen in Schächten und Rampen im Vergleich (LARYSSA)   | 📖 71  |
| <b>02 E 11971B</b> | Verbundprojekt: Anwendbarkeit von Niedertemperatur-Salzschnmelzen für Verschlussmaßnahmen von Endlagern für radioaktiver Abfälle im Wirtsgestein Salz (SalVE), Teilprojekt B  | 📖 91  |
| <b>02 E 12042A</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 | 📖 116 |
| <b>02 E 12133A</b> | Verbundprojekt: Weiterführung der Entwicklung von Ausbau von Grubenbauen für ein HAW-Endlager in Tongestein (AGEnT002), Teilprojekt A   | 📖 150 |

#### Christian-Albrechts-Universität zu Kiel, Christian-Albrecht-Platz 4, 24118 Kiel

- |                    |  |       |
|--------------------|--|-------|
| <b>02 E 11849B</b> | Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt B | 📖 173 |
|--------------------|--|-------|

#### DMT GmbH & Co. KG, Am TÜV 1, 45307 Essen

- |                    |   |       |
|--------------------|---|-------|
| <b>02 E 12133B</b> | Verbundprojekt: Weiterführung der Entwicklung von Ausbau von Grubenbauen für ein HAW-Endlager in Tongestein (AGEnT002), Teilprojekt B | 📖 152 |
|--------------------|---|-------|

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

- |                    |  |      |
|--------------------|--|------|
| <b>02 E 11921A</b> | Verbundprojekt: Untersuchungen zur SEPARation von AMericiuM aus hochradioaktiven Abfalllösungen (SEPAM), Teilprojekt A | 📖 77 |
|--------------------|--|------|

- 02 W 6279** Neu- und Weiterentwicklung von Konzepten, Methoden und Techniken für die internationale Kernmaterialüberwachung, insbesondere im Rahmen der nuklearen Entsorgung (SAFEGUARDS-3)  195

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

- 02 E 11849C** Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt C  175

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

- 02 E 11911B** Verbundprojekt: Vorhersage der heterogenen Radionuklidsorption auf Kluft- und Störungsflächen in granitischen Gesteinen: Parametrisierung und Validierung verbesserter reaktiver Transportmodelle (WTZ-Granit), Teilprojekt B  75

- 02 E 12153A** Verbundprojekt: Erosion von Bentonit unter In-situ Bedingungen durch Einwirkung natürlicher Wässer in geologischen Tiefenlagern (EVIDENT), Teilprojekt A  154

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

- 02 E 11466** Entwicklung von Rechenmodulen für die integrierte Modellierung von Transportprozessen im einschlusswirksamen Gebirgsbereich (RepoTREND+)  17

- 02 E 11577B** Verbundprojekt: Sicherheitsanalytische Untersuchungen zu Endlagersystemen im Kristallin (SUSE), Teilprojekt B  22

- 02 E 11627** Arteigene Versatz- und Verschlussmaterialien für die Endlagerung hochradioaktiver Abfälle in Tonformationen (AVET)  24

- 02 E 11668A** Verbundprojekt: Smart- $K_d$  in der Langzeitsicherheitsanalyse - Anwendungen (SMILE), Teilprojekt A  26

- 02 E 11698** Untersuchung thermisch-hydraulisch-mechanisch-chemischer Einwirkungen auf zementbasierte Dichtelemente (THYMECZ)  28

- 02 E 11819** Mineralumwandlung und Sorption bei erhöhten Temperaturen in geklüfteten Kristallingesteinen und Barrierematerial (MUSE)  30

- 02 E 11829** Tonsteinforschung im Felslabor Mont Terri ab Phase 25 (MonTe-25)  32

- 02 E 11870A** Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt A  53

- 02 E 11880** Sicherheitsrelevante Untersuchungen zur Bentonitaufsättigung (SIRUB)  65

<b>02 E 11941</b>	Wissenschaftliche Grundlagen zum Nachweis der Langzeitsicherheit von Endlagern (WiGru-9)	 84
<b>02 E 11981A</b>	Verbundprojekt: Implementierung eines Monitoringsystems zur Evaluierung der Korrosionsvorgänge an Behältermaterialien in Bentonit-basierten Endlagerkonzepten (IMKORB), Teilprojekt A	 93
<b>02 E 12012A</b>	Verbundprojekt: Weiterentwicklung von d <sup>3f++</sup> : Hydrogeologische Modellierung im regionalen Maßstab (HYMNE II), Teilprojekt A	 106
<b>02 E 12022B</b>	Verbundprojekt: Internationales Benchmarking zur Verifizierung und Validierung von TH <sup>2</sup> M-Simulatoren insbesondere im Hinblick auf fluiddynamische Prozesse in Endlagersystemen - Erweiterung auf multiphysikalische Ansätze und mehrdimensionale Modellgeometrien (BenVaSim II), Teilprojekt B	 112
<b>02 E 12032</b>	Methoden zur experimentellen und numerischen Analyse der geologischen Barriere eines Endlagers in tonreichen Sedimentgesteinsformationen (MAGNUS)	 114
<b>02 E 12042B</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. B	 118
<b>02 E 12052B</b>	Verbundprojekt: Konkurrenz und Reversibilität bei Sorptionsvorgängen (KuRSiv), Teilprojekt B	 122
<b>02 E 12122A</b>	Verbundprojekt: Stabilität von Mineralphasen des Eisens im Nahfeld eines Endlagers (STAMINA), Teilprojekt A	 146
<b>02 E 12153C</b>	Verbundprojekt: Erosion von Bentonit unter In-situ Bedingungen durch Einwirkung natürlicher Wässer in geologischen Tiefenlagern (EVIDENT), Teilprojekt C	 158
<b>02 E 12163B</b>	Verbundprojekt: Vertikales hydraulisches Dichtsystem nach dem Sandwich-Prinzip - Hauptprojekt Phase 2 (Sandwich-HP2), Teilprojekt B	 162

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

<b>02 E 11860B</b>	Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt B	 38
<b>02 E 11870B</b>	Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt B	 55
<b>02 E 11911A</b>	Verbundprojekt: Vorhersage der heterogenen Radionuklidsorption auf Kluft- und Störungsflächen in	 73

granitischen Gesteinen: Parametrisierung und Validierung verbesserter reaktiver Transportmodelle (WTZ-Granit), Teilprojekt A

- 02 E 12052A** Verbundprojekt: Konkurrenz und Reversibilität bei Sorptionsvorgängen (KuRSiv), Teilprojekt A  120
- 02 E 12072B** Verbundprojekt: MgO-Beton C3 als langzeitbeständiges und schnellwirksames Verschlusselement für Schachtverschlüsse zukünftiger HAW-Endlager im Salinar (MgO-C3), Teilprojekt B  134
- 02 E 12112A** Verbundprojekt: Systematic sensitivity analysis for mechanistic geochemical models using field data from crystalline rock (SANGUR), Teilprojekt A  142

**Helmholtz-Zentrum Potsdam Deutsches GeoForschungsZentrum GFZ, Telegrafenberg, 14473 Potsdam**

- 02 E 12062B** Verbundprojekt: Spannungsprognosen – Quantifizierung und Reduzierung von Ungewissheiten mit geomechanisch-numerischen Untergrundmodellen (SQuaRe), Teilprojekt B: Bayesischer Ansatz zur Kalibrierung geomechanisch-numerischer Modelle mit Reduzierung von Ungewissheiten  128

**IfG Institut für Gebirgsmechanik GmbH, Friederikenstr. 60, 04279 Leipzig**

**Johannes Gutenberg-Universität Mainz, Saarstraße 21, 55122 Mainz**

- 02 E 11860A** Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt A  36

**Johann Wolfgang Goethe-Universität Frankfurt am Main, Senckenberganlage 31, 60325 Frankfurt am Main**

- 02 E 12012B** Verbundprojekt: Weiterentwicklung von d<sup>3f++</sup>: Hydrogeologische Modellierung im regionalen Maßstab (HYMNE II), Teilprojekt B  108

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

- 02 E 12001A** Verbundprojekt: Sandwich Support Projekt 1: Heterogene Bentonithydratation (SANDWICH-SP1), Teilprojekt A  102
- 02 E 12052C** Verbundprojekt: Konkurrenz und Reversibilität bei Sorptionsvorgängen (KuRSiv), Teilprojekt C  124
- 02 E 12122B** Verbundprojekt: Stabilität von Mineralphasen des Eisens im Nahfeld eines Endlagers (STAMINA), Teilprojekt B  148
- 02 E 12153B** Verbundprojekt: Erosion von Bentonit unter In-situ Bedingungen durch Einwirkung natürlicher Wässer in geologischen Tiefenlagern (EVIDENT), Teilprojekt B  156

- 02 E 12163A** Verbundprojekt: Vertikales hydraulisches Dichtsystem nach dem Sandwich-Prinzip - Hauptprojekt Phase 2 (Sandwich-HP2), Teilprojekt A  160

**Leibniz Universität Hannover, Welfengarten 1, 30167 Hannover**

- 02 E 11849F** Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt F  183
- 02 E 11870E** Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt E  61
- 02 E 11870F** Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt F  63
- 02 E 11981C** Verbundprojekt: Implementierung eines Monitoringsystems zur Evaluierung der Korrosionsvorgänge an Behältermaterialien in Bentonit-basierten Endlagerkonzepten (IMKORB), Teilprojekt C  98
- 02 E 12092** Recherche und Beschreibung für das Endlagerbehältersystem in Frage kommende Materialien (ElaBeMa)  138

**Öko-Institut. Institut für angewandte Ökologie e. V., Merzhauser Str. 173, 79100 Freiburg**

- 02 E 11849G** Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt G  186

**Rheinisch-Westfälische Technische Hochschule Aachen, Templergraben 55, 52062 Aachen**

- 02 E 11931** Einfluss der thermischen Reife auf die gekoppelten hydro-mechanischen Eigenschaften niedrig-durchlässiger Tonsteine – Feld & Laborskala (Maturity)  81
- 02 E 12062C** Verbundprojekt: Spannungsprognosen – Quantifizierung und Reduzierung von Ungewissheiten mit geomechanisch-numerischen Untergrundmodellen (SQuaRe), Teilprojekt C: Ungewissheiten durch geometrische Parameter, Erstellung von Ersatzmodellen durch Methoden der künstlichen Intelligenz  130
- 02 W 6281** Antineutrino-Detektion zur Überwachung radioaktiver Abfälle (NU-SAFEGUARDS)  197

**Ruhr-Universität Bochum, Universitätsstr. 150, 44801 Bochum**

- 02 E 12001B** Verbundprojekt: Sandwich Support Projekt 1: Heterogene Bentonithydratation (SANDWICH-SP1), Teilprojekt B  104

**Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT),  
Hermann-von-Helmholtz-Platz 1, 76344 Eggenstein-Leopoldshafen**

- |                    |   |   |
|--------------------|---|---|
| <b>02 E 11849D</b> | Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt D  |  177 |
| <b>02 E 11849E</b> | Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt E  |  179 |
| <b>02 E 11860C</b> | Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt C  |  40  |
| <b>02 E 11921B</b> | Verbundprojekt: Untersuchungen zur SEParation von AMericiem aus hochradioaktiven Abfalllösungen (SEPAM), Teilprojekt B  |  77  |
| <b>02 E 11981B</b> | Verbundprojekt: Implementierung eines Monitoringsystems zur Evaluierung der Korrosionsvorgänge an Behältermaterialien in Bentonit-basierten Endlagerkonzepten (IMKORB), Teilprojekt B |  96  |

**Technische Universität Bergakademie Freiberg, Akademiestraße 6, 09599 Freiberg**

- |                    |   |   |
|--------------------|---|---|
| <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 |  69  |
| <b>02 E 11961</b>  | Entwicklung eines salzgrusbasierten Versatzkonzepts unter der Option Rückholbarkeit - Phase 1 (SAVER)   |  87  |
| <b>02 E 11971A</b> | Verbundprojekt: Anwendbarkeit von Niedertemperatur-Salzschmelzen für Verschlussmaßnahmen von Endlagern für radioaktiver Abfälle im Wirtsgestein Salz (SalVE), Teilprojekt A   |  89  |
| <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  |  132 |
| <b>02 E 12163C</b> | Verbundprojekt: Vertikales hydraulisches Dichtsystem nach dem Sandwich-Prinzip - Hauptprojekt Phase 2 (Sandwich-HP2), Teilprojekt C   |  164 |
| <b>02 E 12173</b>  | Entwicklung eines salzgrusbasierten Versatzkonzepts unter der Option Rückholbarkeit - Phase 2 (SAVER II)  |  166 |

**Technische Universität Berlin, Straße des 17. Juni 135, 10623 Berlin**

- 02 E 11849H**    Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt H  188

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

- 02 E 11849I**    Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt I  191
- 02 E 12102**    Entwicklung einer selbstlernenden Modellierungsmethodik zu geomechanischen und geotechnischen Prozessen am Beispiel der Planungs- und Auffahrungsphase einer Einlagerungsstrecke eines Tiefenlagers (SEMOTI)  140

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

- 02 E 11849A**    Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt A  169
- 02 E 11991**    Entwicklung und Validation einer neuartigen Versuchstechnik für triaxiale Kriechversuche bei geringer deviatorischer Belastung (KRIECHTECH)  100
- 02 E 12022A**    Verbundprojekt: Internationales Benchmarking zur Verifizierung und Validierung von TH<sup>2</sup>M-Simulatoren insbesondere im Hinblick auf fluiddynamische Prozesse in Endlagersystemen - Erweiterung auf multiphysikalische Ansätze und mehrdimensionale Modellgeometrien (BenVaSim II), Teilprojekt A  110
- 02 E 12082**    Langzeitsicheres Abdichtungselement aus Salzschnittblöcken - Durchführung, Auswertung und Reanalyse von THM-Versuchen unter triaxialer Extensionsbeanspruchung (SSBVIER)  136
- 02 E 12112B**    Verbundprojekt: Systematic sensitivity analysis for mechanistic geochemical models using field data from crystalline rock (SANGUR), Teilprojekt B  144

**Technische Universität Darmstadt, Karolinenplatz 5, 64289 Darmstadt**

- 02 E 12062A**    Verbundprojekt: Spannungsprognosen – Quantifizierung und Reduzierung von Ungewissheiten mit geomechanisch-numerischen Untergrundmodellen (SQuaRe), Teilprojekt A: Ungewissheiten durch Materialparameter, Diskretisierung, Initial- und Randbedingungen  126

**Technische Universität Dresden, Helmholtzstr. 10, 01069 Dresden**

- 02 E 11860G** Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt G  48

**Technische Universität München, Arcisstraße 21, 80333 München**

- 02 E 11860E** Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt E  44
- 02 E 11870D** Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt D  59

**Universität des Saarlandes, Campus, 66123 Saarland**

- 02 E 11860D** Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt D  42

**Universität Greifswald, Domstr. 11, 17489 Greifswald**

- 02 E 11870C** Verbundprojekt: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Phase II (UMB II), Teilprojekt C  57

**Universität Heidelberg, Grabengasse 1, 69117 Heidelberg**

- 02 E 11860H** Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt H  51

**Universität Kassel, Mönchebergstr. 19, 34125 Kassel**

- 02 E 11849J** Verbundprojekt: Transdisziplinäre Forschung zur Entsorgung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland (TRANSENS), Teilprojekt J  193

**Universität Potsdam, Am Neuen Palais 10, 14469 Potsdam**

- 02 E 11860F** Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen - Phase II (GRaZ II), Teilprojekt F  46